

Universidad Nacional de Rosario
Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y
Agrimensura



Tesis Doctoral

**Modelización de flujos turbulentos multifásicos
aplicada al diseño de sistemas inyectores de nafta
en motores de combustión interna.**

César I. Pairetti

Directores: Dr. Norberto Nigro
 Dr. Santiago Márquez Damián

Miembros del Jurado: Dr. Guillermo Artana
 Dra. Analía Gastón
 Dr. Mario Storti

Tesis presentada en la Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, en
cumplimiento parcial de los requisitos para optar al título de

Doctor en Ingeniería

Noviembre de 2018

Esta tesis va dedicada a mi familia.

*Lo importante no es llegar,
lo importante es el camino.*

Fito Paez

Declaration

Certifico que el trabajo incluido en esta tesis es el resultado de tareas de investigación originales y que no ha sido presentado para optar a un título de postgrado en ninguna otra Universidad o Institución.

César I. Pairetti
Noviembre 2018

Agradecimientos

Esta tesis es el fruto de un esfuerzo colectivo y en las siguientes líneas quiero reconocer los principales actores de esta tarea.

Agradezco a las instituciones que han apoyado económicamente mi doctorado: el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) y la Universidad Nacional del Rosario (UNR). En particular, las tareas diarias de este proyecto fueron desarrolladas en la Escuela de Ingeniería Mecánica (FCEIA-UNR) con estrecha colaboración del Centro de Investigación de Métodos Computacionales (UNL-CONICET).

A mis directores, los Drs. Norberto Nigro y Santiago Márquez Damián, les agradezco su dedicación para guiarme durante este trayecto, aportando valiosas enseñanzas tanto técnicas como personales. Al Dr. Guillermo Rodríguez le agradezco especialmente por mostrarme este camino y acompañarme constantemente a cada paso. Al Prof. Stéphane Zaleski le agradezco particularmente por haberme recibido y orientado durante las dos ocasiones en que visité el Instituto D'Alembert; muchos de los principales aportes de esta tesis son fruto de dichas estancias. Asimismo, agradezco al Dr. Stéphane Popinet por su intenso trabajo en el desarrollo de Basilisk y al Dr. Wojciech Aniszewski por el tiempo que empleó durante mis estancias en ayudarme a trabajar con este código.

A mis colegas, tanto de la EIM como del CIMEC, les agradezco por los momentos compartidos a lo largo de estos 5 años y la amistad que espero sigamos manteniendo. Particularmente a los Drs. Horacio Aguerre y César Venier por los debates desarrollados durante la escritura de los trabajos publicados, que también han aportado significativamente a mi formación.

A la comunidad de Software Libre, que ha jugado un rol fundamental en esta tesis, particularmente a los proyectos de OpenFOAM[®], Basilisk, Ubuntu, Octave, python, gnuplot y LaTeX, herramientas que he empleado a diario para poder desarrollar mis tareas de investigación. Asimismo, agradezco a los administradores de los centros de cómputo, tanto locales (CIMEC) como internacionales (TGCC).

A mi familia, especialmente a Belén, a mis viejos y a mis hermanos que siempre estuvieron, y están, a mi lado para darme fuerza y ganas de ser un poco mejor cada día.

Resumen

Los motores de combustión interna son la principal fuente de potencia en los sistemas de transporte. Su uso intensivo impulsa la necesidad de aumentar su eficiencia energética y reducir su impacto ambiental. Ambos aspectos están estrechamente relacionados al desarrollo de la combustión en el cilindro, que depende principalmente de la proporción aire-combustible al momento de la ignición. De esta manera, el método más empleado para dosificar el combustible en los vehículos modernos es la inyección directa. Durante los primeros instantes de inyección, el combustible penetra en la cámara de combustión fragmentándose en pequeñas gotas; este proceso, conocido como atomización, está presente en gran cantidad de fenómenos físicos y aplicaciones industriales, siendo un objeto de interés tanto para la ciencia como para la ingeniería.

Esta tesis se centra en el desarrollo de técnicas numéricas para la simulación de flujos multifásicos turbulentos y su aplicación para caracterizar los mecanismos de atomización en condiciones similares a la inyección de combustible en motores.

Respecto al primer punto, se describe la formulación matemática del método *Volume of Fluid* (VOF) con representación geométrica de la interfase en mallas cartesianas, implementado en la librería Basilisk de software libre. En este contexto, se definen las estrategias de Refinamiento Adaptativo de Malla (*Adaptive Mesh Refinement*, AMR) empleadas principalmente para limitar el error de numérico. Luego se extiende la técnica de AMR para aplicar modelos implícitos de turbulencia (ILES) adaptativos, utilizando estrategias de refinamiento basadas en una función indicadora que relaciona las escalas locales de turbulencia con el filtro LES dado por el paso de malla. El conjunto de estas tres herramientas (VOF, AMR e ILES), define la metodología propuesta para la simulación de flujos multifásicos turbulentos.

Esta implementación se utiliza para simular la atomización de un chorro cilíndrico bajo diversas condiciones de inyección. En cada caso se caracteriza el aerosol producido mediante un análisis estadístico, determinando la distribución espacial, el tamaño y la velocidad de cada gota, definiendo las tendencias que determinan la evolución global del sistema. Estos resultados vinculan los mecanismos de fragmentación a la interacción entre la turbulencia y las inestabilidades hidrodinámicas de la interfase.

A partir de las condiciones de flujo observadas en la atomización de chorros, se simulan problemas simplificados de fragmentación de gotas, donde se estudia con mayor detalle la ruptura por efectos aerodinámicos. Finalmente, los resultados de atomización secundaria se utilizan para evaluar la precisión de los modelos algebraicos empleados usualmente para representar la inyección en la simulación de motores.

Abstract

Internal Combustion Engines (ICEs) are the main power source in transport systems. Its intensive use pushes the need to seek improvement of energetic efficiency and environmental impact. Both aspects depend heavily on the fuel-air mix properties within the cylinder. In this context, the most extended method to deliver the fuel is direct injection. During the first stages of injection, the fuel jet enters into the combustion chamber and breaks up into droplets. This phenomenon is called atomization, and defines the liquid fuel distribution into a spray that evaporates and mixes with the air.

This thesis focuses in the development of efficient numerical techniques for the simulation of turbulent multiphase flow and its use to characterize the atomization mechanisms presente in fuel injection problems.

Regarding the former, the mathematical basis are given for the Volume of Fluid Method (VOF) with geometrical interface reconstruction, as it is implemented in Basilisk open-source library. In this framework, the Adaptive Mesh Refinement (AMR) strategies, employed to bound the numerical error of the solution, are described. This technique is extended to apply adaptive Large Eddy Simulation (LES) models by using a refinement strategy based on an indicator function that relates the local turbulent scales and the LES filter given by the mesh step. The combination of these three methods (VOF, AMR and LES) defines an efficient solver for turbulent multiphase flow simulation.

The developed computational tool is applied to simulate the atomization of a round liquid jet for several injection conditions. For each case, the spray characteristics are described by means of statistical analysis, measuring the droplets size, position and velocity. The observed trends are then used to define the gobal evolution of the system. These results link the atomization mechanisms to the interaction between turbulence and hidrodynamic instabilities.

Based on the flow properties observed in the previous problem, a set of drop atomization cases are simulated, where the droplet aerodynamic breakup is studied with more detail. Finally, these secondary atomization results are employed to evaluate the accuracy of algebraic injection models usually applied to ICE simulation.

Índice general

Índice de figuras	XVII
Índice de cuadros	XXIII
Nomenclature	XXV
1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.1.1. Herramientas computacionales para diseño de motores	3
1.1.2. Simulación y modelado de flujos multifásicos turbulentos	4
1.2. Objetivo de la tesis	5
1.3. Metodología	5
1.4. Organización de este documento	6
1.5. Contribuciones científicas	7
1.5.1. Publicaciones en Revistas indexadas	8
1.5.2. Publicaciones en Congresos	8
1.5.3. Otras participaciones en Congresos	9
2. Atomización e inyección	11
2.1. Dinámica de chorros líquidos cilíndricos	11
2.1.1. Revisión histórica: estudio de la fragmentación de chorros	12
2.1.2. Análisis de estabilidad y estimación del tiempo de <i>breakup</i>	13
2.1.3. Clasificación de regímenes de fragmentación	14
2.2. Inyección de combustible en motores	17
2.2.1. Formación de carga en el cilindro	18
2.3. Modelos de inyección en CFD de motores	22
2.3.1. Concepto de parcela y partícula	22
2.3.2. Acoplamiento entre fases continua y dispersa	23
2.4. Modelos de atomización por parcelas	26
2.4.1. Descripción general	26

2.4.2.	Huh-Gosman	28
2.4.3.	Kelvin-Helmholtz	30
2.4.4.	Rayleigh-Taylor	31
2.5.	Sumario de la problemática de inyección	33
3.	Mecánica de Flujos Multifásicos	35
3.1.	Formulación general de un continuo multiespecie	36
3.1.1.	Ecuaciones diferenciales de balance local	36
3.1.2.	Función indicadora de fase e identidades entre promedios	39
3.2.	Modelos de flujo y sistemas de EDP cerrados	40
3.2.1.	Flujo compresible	40
3.2.2.	Flujo bifásico incompresible con tensión superficial	41
3.3.	Descripción de la turbulencia	42
3.3.1.	Transporte de energía cinética	43
3.3.2.	Descomposición del flujo	44
3.4.	Sumario y aplicación a problemas de atomización	47
4.	Métodos Numéricos aplicados a Flujos Multifásicos Turbulentos	49
4.1.	Métodos de resolución numérica de Ecuaciones en Derivadas Parciales	50
4.2.	Fundamentos del Método de Volúmenes Finitos	51
4.2.1.	Discretización de las integrales de volumen	53
4.2.2.	Discretización de las integrales de superficie	54
4.2.3.	Discretización temporal	59
4.2.4.	Sistema de ecuaciones lineales	61
4.3.	Resolución de Navier-Stokes por FVM	62
4.3.1.	Métodos segregados en mallas colocadas	63
4.3.2.	Método de proyección aproximada	64
4.3.3.	Generalización de los métodos de proyección	65
4.3.4.	El algoritmo SIMPLE y derivados	66
4.3.5.	El algoritmo PISO	67
4.3.6.	El algoritmo PIMPLE	68
4.4.	Modelos de flujos multifásicos	69
4.4.1.	Modelado de fases dispersas	69
4.4.2.	Representación geométrica de la interfase	71
4.4.3.	Métodos de captura de interfase	72
4.5.	VOF geométrico lineal a trozos	73
4.5.1.	Reconstrucción de interfase y advección geométrica en mallas cartesianas	75

4.5.2.	Cálculo de curvatura para fuerzas de tensión superficial	79
4.5.3.	Esquemas de advección <i>momentum-conserving</i>	81
4.6.	Modelos de turbulencia	84
4.6.1.	Resolución de las micro-escalas turbulentas	84
4.6.2.	Reducción del costo computacional	85
4.6.3.	Separación de escalas	85
4.7.	Refinamiento de malla adaptativo	89
4.7.1.	Mallas tipo <i>tree</i>	90
4.7.2.	Estrategias de refinamiento	92
4.8.	Sumario: Algoritmo VOF-PLIC con AMR-ILES	95
5.	Atomización Primaria	97
5.1.	DNS de atomización primaria: estado del arte	98
5.2.	Consideraciones generales	100
5.2.1.	Principales problemáticas en la simulación de atomización . .	100
5.2.2.	Herramientas para la simulación de atomización	101
5.3.	Definición de los casos de estudio	102
5.3.1.	Propiedades y grupos adimensionales	103
5.3.2.	Condiciones de contorno	104
5.3.3.	Resumen de simulaciones realizadas	106
5.4.	Descripción visual de las estructuras de flujo	106
5.4.1.	Efecto de la turbulencia y estabilidad de gotas	111
5.4.2.	Efectos de modelado: condición de contorno y paso de malla .	113
5.4.3.	Validación a partir de datos experimentales	115
5.5.	Caracterización comparativa de casos	118
5.5.1.	Efecto de la condición de contorno	120
5.5.2.	Variación de la tensión superficial	124
5.5.3.	Estudio de convergencia en malla	132
5.6.	Caracterización detallada de caso pulsante	146
5.6.1.	Análisis estadístico de gotas	146
5.7.	Sumario de atomización primaria	156
6.	Atomización Secundaria	159
6.1.	Atomización de gotas por efectos aerodinámicos	159
6.2.	Casos de estudio y parámetros de simulación	161
6.3.	Análisis comparativo de resultados	163
6.4.	Modos de atomización secundaria desarrollados	171
6.4.1.	RTP: atomización a Weber moderado	171

6.4.2.	SIE, atomización a Weber alto	173
6.5.	Ajuste de modelos Lagrangianos de atomización secundaria	176
6.5.1.	Variables y parámetros de ajuste en el modelo KH	177
6.5.2.	Relación entre atomización y evaporación	180
6.6.	Sumario de atomización secundaria	181
7.	Conclusiones	183
7.1.	Sumario de tesis	183
7.2.	Contribuciones principales	184
7.2.1.	Simulación de Flujos Multifásicos turbulentos	184
7.2.2.	Análisis físico de los procesos de atomización	184
7.2.3.	Modelos de inyección para la simulación de motores	185
7.3.	Trabajos complementarios y prospectivas	185
7.3.1.	Aportes relacionados a los métodos numéricos	185
7.3.2.	Aportes a los códigos de simulación empleados	186
7.3.3.	Trabajos a futuro	186
Apéndice A.	<i>Solver</i> de flujo compresible	187
A.1.	Ecuaciones de gobierno	187
A.1.1.	Resolución numérica de las ecuaciones de gobierno	188
Apéndice B.	Implentación de VOF algebraico	193
Bibliografía		197

Índice de figuras

1.1. Consumo de energía global en cuatrillones (10^{15}) de BTU en el sector transporte, clasificado por combustible (izquierda) y por tipo de transporte (derecha) [26]	2
1.2. Límite de emisiones para vehículos diesel ligeros (izquierda) y pesados (derecha) [g/km] [42, 40].	2
2.1. Inestabilidad en interfase única (a) y análisis de una lámina delgada (b)	13
2.2. Separación de regímenes de atomización (izquierda) y representación esquemática (derecha) [10]	15
2.3. Regímenes de atomización [136]	16
2.4. Regiones de atomización en un chorro cilíndrico según Faeth <i>et. al.</i> [43].	17
2.5. Instancias del proceso de inyección, adaptado de [10]	18
2.6. Desarrollo de flujo turbulento y cavitante en la boquilla, en función de la diferencia de presiones, adaptado de [10].	20
2.7. Regiones de validez para modelos Kelvin-Helmholtz y Rayleigh-Taylor	27
3.1. Volumen de control con 2 fases separadas por la interfase A_f [180] . .	36
3.2. Correlación para la perturbación de velocidad y escalas integrales [150].	45
3.3. Cascada de energía con representación esquemática de decaimiento de vórtices [150].	46
4.1. Dominio continuo Ω (a), malla no estructurada (b) y detalle de celdas vecinas (c)	51
4.2. Descomposición de vector área para caras no ortogonales	56
4.3. Problema de de advección pura 1D: Soluciones (arriba) y errores (abajo): pulso cuadrado (izquierda) y una onda sinusoidal (derecha). .	58
4.4. Diferentes escenarios de flujos multifásicos. Interfase resuelta por la malla (a), fase dispersa de longitud sub-grilla (b) y combinación de escalas(c). Adaptación de [102]	70

4.5. Representación de interfase por diversos métodos: exacta (a), <i>front-tracking</i> (b), VOF-PLIC (c), <i>Level-Set</i> (d). Adaptación de [174]	72
4.6. Definición de la reconstrucción en una celda 2D (izquierda) y 3D (derecha) [174].	76
4.7. Flujo de VOF a través de la cara izquierda en una celda unitaria (izquierda), error por <i>splitting</i> direccional (derecha).	77
4.8. Flujo de momento consistente con el flujo másico de VOF	82
4.9. Gota suspendida en el instante $t = 0,4t_c$ empleando diversas resoluciones de malla (de izquierda a derecha: 8, 16 y 32 celdas por diámetro). Fila superior: esquemas <i>momentum-conserving</i> . Fila inferior: esquemas no <i>momentum-conserving</i> . Se representa la componente de vorticidad normal al plano de visualización	83
4.10. Separación de escalas resueltas (azul) y modeladas (rojo) para LES. Adaptación de [150].	88
4.11. Esquema de celdas en malla <i>quadtree</i> . Nodos activos (a), restricciones y prolongaciones (b) en rojo y azul respectivamente. Representación en forma de árbol (c).	89
4.12. Ejemplo de interpolación bi-lineal en malla <i>quadtree</i> . Fórmula 1D (a), extensión al caso bidimensional(b).	90
4.13. Mallas para perfiles NACA: <i>staircase</i> en Gerris, coloreada por nivel de refinamiento (a) y <i>body-fitted</i> en OpenFOAM [®] , no estructurada con refinamiento en capa límite (b).	91
5.1. Vista isométrica: dominio y detalle de evolución inicial con refinamiento adaptativo	103
5.2. Vista isométrica: evolución temporal del caso MPF.	107
5.3. Comparación de mecanismos de atomización con referencias: (a) Jarabashi <i>et. al.</i> [72], (b) Ling <i>et. al.</i> [94] (c) Caso MPF.	108
5.4. Vista anterior de la punta del chorro: (a) caso MPF ($Re = 5800$) y (b) resultados de Shinjo y Umemura ($Re = 3940$) [159].	109
5.5. Vista lateral de núcleo líquido en caso MPF, $t = (9,4, 9,6, 9,8)\mu s$. Se resalta en dos óvalos un ligamento que se desprende del núcleo. Los detalles en la fila inferior corresponden región donde se observa perforación de láminas.	110
5.6. Iso-superficie Q-criterion coloreada por enstrofia en escala logarítmica (caso MPF, $t = 12.00\mu s$).	111
5.7. Nube de gotas para caso MPF. Detalles de gotas: externas (a) y en la región interna de la punta (b).	112

5.8. Vistas lateral de VOF para MPF (a), comparación con casos de referencia: Mènard [105] (b) y Spray A [151] (c). Resultados a $t = 10\mu s$. Pasos de malla $h = (0,48; 1,1; 2,3)\mu m$ respectivamente.	113
5.9. Vistas isométricas de los casos MPG, MPF y AKG(arriba hacia abajo). Representación de magnitud de velocidad (izquierda, chorro y gotas), curvatura de superficie (derecha, núcleo coherente). Fotogramas a $t = 12\mu s$	114
5.10. Microscopías en cámara de <i>spray</i> [51]. Fotografías espaciadas cada $1\mu s$ en el rango $(5,13)\mu s$	117
5.11. Comparación de distribución de gotas para el caso MPF con datos experimentales [191].	118
5.12. Caso A, comparación de condiciones de contorno: histograma de tamaño de gotas	119
5.13. Caso A, comparación de condiciones de contorno: distribución acumulativa en volumen	120
5.14. Caso A, comparación de condiciones de contorno: evolución temporal del diámetro medio de Sauter.	121
5.15. Caso A, comparación de condiciones de contorno: histogramas de dos vías	122
5.16. Caso A, comparación de condiciones de contorno: evolución temporal de los histogramas y fotograma lateral de la condición final ($t = 13\mu s$).	123
5.17. Casos pulsantes M y A: Vista lateral, escala de colores por curvatura (mitad superior) y velocidad axial (mitad inferior), $t = 9\mu s$. Las escalas son válidas para ambos casos.	124
5.18. Casos pulsantes M y A, histogramas: diámetro de gotas para casos pulsantes M y A, a tiempos 3, 6, 9 y $12\mu s$. Gotas agrupadas en rango de $1\mu m$	125
5.19. Ajuste de histogramas normalizados mediante función log-normal.	126
5.20. Casos pulsantes M y A, distribución acumulativa de volumen en función de D_{30} para $t = 3, 6, 9$ y $11\mu s$. Rangos de diámetro cada $1\mu m$	127
5.21. Distribución Acumulativa de esfericidad $11\mu s$ normalizada por cantidad de gotas y por volumen.	128
5.22. Casos pulsantes M y A, histogramas de dos vías. Arriba: cantidad de gotas en rangos de $D_{30}-V_d$. Abajo: volumen atomizado en rangos de Re_g-We_g . Resultados para $t = 11\mu s$	129
5.23. Casos pulsantes M y A, evolución temporal de variables globales del <i>spray</i> . De arriba hacia abajo, momento lineal, penetración y masa líquida inyectada, Diámetro Medio de Sauter ($SMD = \overline{D_{32}}$)	130

5.24. Caso M ($h = 1.4 \mu\text{m}$), evolución temporal de wavelets medios (izquierda) y estadísticas de la región fuera de rango (derecha).	132
5.25. Caso M ($h = 1.42 \mu\text{m}$, $t = 15 \mu\text{s}$). Representación de wavelets (vista planta) y proporción h/η (vista lateral) en los planos de simetría del dominio	133
5.26. Campo VOF con medición de espesor en lámina para el caso MPF. . .	135
5.27. Caso M, convergencia en malla: histograma comparativo de cantidad de gotas. Poblaciones agrupadas cada $1 \mu\text{m}$	137
5.28. Caso M, convergencia en malla: distribuciones normalizadas para $t = 12 \mu\text{s}$, ajuste por PDF log-normal.	137
5.29. Caso M, convergencia en malla: distribución acumulativa en volumen	138
5.30. Caso M, convergencia en malla: esfericidad de gotas	138
5.31. Caso M, convergencia en malla: evolución temporal de los histogramas pesados por volumen.	139
5.32. Evolución temporal de volumen atomizado total (V_t) y en gotas de diámetro menor a $3 \mu\text{m}$	140
5.33. Proporción de gotas correctamente resueltas en casos MPM y MPF. .	141
5.34. Caso M, convergencia en malla: histogramas de dos vías, caracterización de la nube	142
5.35. Onda construida mediante dos arcos de circunferencia (a) y representación VOF-PLIC con ajuste parabólico de curvatura (b)	143
5.36. Elongación de lámina 2D resuelta con dos niveles de refinamiento. Fotogramas para tiempos adimensionales $t^* = (0,1; 1,1; 2,2)$	144
5.37. Corte de plano medio: campo VOF y u_x a $t = 24 \mu\text{s}$. $h = 1,42 \mu\text{m}$. $L_{bu} \approx 21D_{inj}$	147
5.38. Fotogramas de la evolución para caso MPG.	148
5.39. Histograma, diámetro de gotas (D32 y D30): comparación de resultados para malla $h = 1,42 \mu\text{m}$ y $h = 0,48 \mu\text{m}$ (instantes iniciales)	149
5.40. Posición X de gotas. Histograma (arriba) y Distribución acumulativa (CDF, abajo)	150
5.41. Histograma D30 de gotas dividido por segmentos de distancia a la boquilla.	151
5.42. Posición radial de gotas. Histograma (arriba) y Distribución acumulativa (CDF, abajo)	152
5.43. Histograma D30 de gotas dividido por segmentos de distancia a la boquilla.	153
5.44. Distribución acumulada normalizada en volumen, definición de ángulo de cono.	154

5.45. Evolución temporal de la distribución de volumen atomizado ($h = 1,42\mu\text{m}$).	154
5.46. Variables globales de flujo, de arriba hacia abajo: SMD, momento lineal y velocidad media y máxima. ($h = 1,42\mu\text{m}$)	155
6.1. Modos de <i>breakup</i> de gotas líquidas en corriente gaseosa (izquierda [128]) y de gotas en flujos líquido-líquido (derecha [19])	160
6.2. Geometría y refinamiento de malla inicial. (izquierda). Medidas de referencia relevadas en la gota (derecha), para un caso de gota de lluvia [120].	162
6.3. Selección de casos de atomización secundaria a partir de los histogramas a 2 vías para los casos de chorros M y A.	162
6.4. Caso: M-10-150. Izquierda: Campo $w(u)$ (planta) y h/η (lateral), en planos medios de la gota (desplazados para facilitar la visualización). Derecha: Instancias de deformación hasta la fragmentación (flujo de izquierda a derecha).	164
6.5. Evolución del diámetro D_{32} en tiempo dimensional y adimensional para casos M (arriba) y A (abajo).	165
6.6. Evolución del diámetro D_{32} , R , L para casos M	166
6.7. Evolución del diámetro D_{32} , R , L para casos A	167
6.8. Evolución de velocidades y número de Weber para casos M	168
6.9. Evolución de velocidades y número de Weber para casos A	169
6.10. Vista lateral de deformación y fragmentación de la gota M-10-100. Intervalo de tiempo entre imágenes: $0.11\mu\text{s}$	172
6.11. Progresión de las estructuras de vórtices y velocidad alrededor de la gota M-10-100.	172
6.12. Progresión de la forma de la gota coloreada por curvatura (escala logarítmica) M-10-100.	173
6.13. Distribución de tamaño de gotas en el proceso de atomización (arriba) y distribución acumulativa normalizada por volumen (abajo) para M-10-100.	174
6.14. Progresión en vista lateral de deformación y fragmentación de la gota M-10-150. Intervalo de tiempo entre imágenes: $0.07\mu\text{s}$	175
6.15. Progresión de la forma de la gota coloreada por curvatura (escala logarítmica) M-10-150.	176
6.16. Progresión de las estructuras de vórtices y velocidad alrededor de la gota M-10-150.	176

6.17. Distribución de tamaño de gotas en el proceso de atomización (arriba) y distribución acumulativa normalizada por volumen (abajo) para M-10-150.	177
6.18. Evolución de la geometría de la gota en el caso M-10-150. Tiempo de <i>breakup</i> , aproximadamente $0.43 \mu s$	178
6.19. Evolución de D_{32} para M-10-50, M-10-100 y M-10-150, comparadas con predicciones de modelo Kelvin-Helmholtz	179

Índice de cuadros

2.1. Parámetros típicos de inyección Diesel [10].	19
4.1. Resumen de comparación de las características de VOF (geométrico y algebraico) y Level-set	73
5.1. Definición de parámetros para casos de atomización.	104
5.2. Resumen de condiciones de contorno	105
5.3. Resumen de simulaciones realizadas.	106
5.4. Resumen de escalas características en los problemas estudiados. . . .	136
6.1. Sumario de casos y tiempos de <i>breakup</i>	163
6.2. Tiempos [μ s] de evaporación total de gotas en diversas condiciones de flujo. Valores empleados para las constantes del modelo: $v_g = 1,8 \times 10^{-5}[\text{m}^2/\text{s}]$, $D_{AB} = 5 \times 10^{-6}[\text{cm}^2/\text{s}]$, $Y_\infty = 0$, $Y_r = 0,136$,	181

Nomenclature

Símbolos romanos

D	Diámetro
k	Número de onda
p	Presión
S	Penetración de aerosol
T	Temperatura
$w(\psi)$	Función <i>wavelet</i> aproximado de la variable ψ

Símbolos griegos

$\gamma(k)$	Tasa de crecimiento de la onda en función de su k
μ	Viscosidad dinámica
ν	Viscosidad cinemática
$\omega(k)$	Función dispersión de onda, frecuencia angular en función de k
Φ	Ángulo de aerosol
ρ	Densidad
σ	Coeficiente de tensión superficial
τ	Esfuerzo de corte (tensor)

Subíndices

bu	Propiedades de <i>breakup</i>
g	Propiedades de gas

inj Propiedades de inyector

l Propiedades de líquido

SGS *Sub Grid Stress*

Principales acrónimos

AMR *Adaptive Mesh Refinement*

CFD *Computational Fluid Dynamics*

DDM *Discrete Droplet Model*

DNS *Direct Numerical Simulation*

DPM *Discrete Parcel Model*

EDP Ecuación en Derivadas Parciales

FSM *Fractional Step Method*

FVM *Finite Volume Method*

HG Modelo de atomización de Huh-Gosman

ILES *Implicit Large Eddy Simulation*

KH Modelo de atomización, basado en KHI

KHI *Kelvin-Helmholtz Instability*

LES *Large Eddy Simulation*

MCI Motor de combustión interna

MMC Mecánica de Medios Continuos

PISO *Pressure Implicit Split Operation*

PLIC *Pieceswise Linear Interface Capturing*

PRI *Plateau-Rayleigh Instability*

Re Número de Reynolds

RT Modelo de atomización, basado en RTI

RTI	<i>Rayleigh-Taylor Instability</i>
RTP	<i>Rayleigh-Taylor Piercing</i>
SIE	<i>Shear Induced Entrainment</i>
SIMPLE	<i>Semi Implicit Method for Pressure Linked Equations</i>
VOF	<i>Volume of Fluid</i>
We	Número de Weber
Z	Número de Ohnesorge

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

Debido a su costo relativamente bajo, su alto rendimiento y la diversidad de combustibles que pueden utilizar, los Motores de Combustión Interna (MCI) son y seguirán siendo un elemento crítico para la infraestructura del transporte durante décadas. Lograr un uso sustentable de los MCI es, por lo tanto, una tarea importante para el desarrollo de la humanidad en el corto y mediano plazo [144].

De acuerdo con el último reporte de la Administración de Información de Energía de Estados Unidos (EIA), el transporte representa el 27 % de la energía total consumida a nivel mundial. La Figura 1.1 muestra cómo los combustibles fósiles líquidos representan actualmente la principal fuente de energía empleada en transporte: la proporción conjunta del diésel, gasolina y combustible de aviones abarca más del 80 % del consumo energético.

Asimismo, las proyecciones de consumo indican un crecimiento anual de 1.4 %, alcanzando 155×10^{15} BTU para el 2040, de los cuales casi el 88 % se consumirán en combustibles líquidos [26]. Esto equivale a 163×10^{15} kJ, lo que implica aproximadamente 3.850 millones de toneladas de gasolina.

Por otra parte, la explotación de combustibles fósiles conlleva un alto impacto ambiental provocado por las emisiones resultantes de la combustión. Los óxidos nitrosos (NO_x) pueden afectar hígado, pulmones, bazo e inducir infecciones respiratorias. El material particulado (PM) puede causar cáncer, enfermedades cardio-vasculares y de pulmón. El monóxido de carbono (CO) también puede afectar el corazón y los pulmones. Según la Agencia Europea de Medio Ambiente (EEA) [39], el sector de transporte es el responsable de aproximadamente el 20, 30 y 40 % de la generación mundial de PM, CO y NO_x , respectivamente. A fin de limitar la producción de estos contaminantes, la Unión Europea ha desarrollado una progresión de normas (Euro)

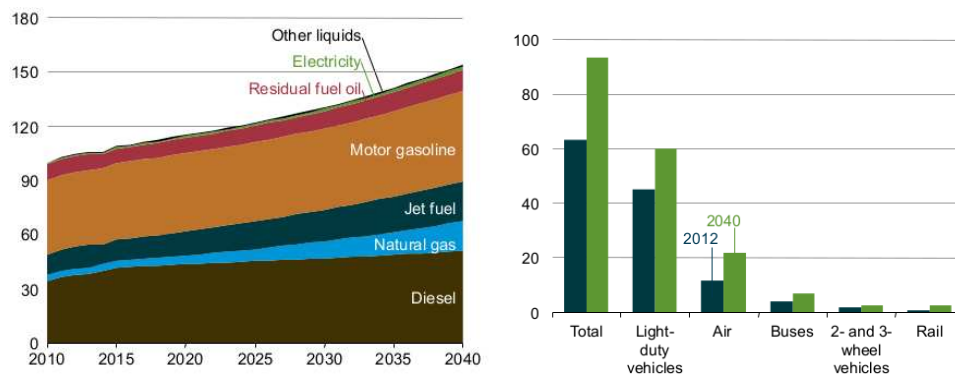


Figura 1.1: Consumo de energía global en cuatrillones (10¹⁵) de BTU en el sector transporte, clasificado por combustible (izquierda) y por tipo de transporte (derecha) [26]

que restringen la tasa de emisiones permitida por vehículo, como se muestra en la Figura 1.2. Desde el año 2004, la legislación Argentina determina que los límites de emisiones de motores diesel estarán regidos por las normas europeas, implementando la norma Euro 6 a partir de 2019.

En este contexto, es fundamental encontrar alternativas que permitan emplear los recursos energéticos de forma más eficiente y limpia. Si bien los vehículos híbridos y eléctricos podrían potencialmente reemplazar a los sistemas de potencia convencionales, las proyecciones a futuro estiman que estas tecnologías estarán presentes en menos del 20% del transporte mundial en el año 2035 [99, 114]. Más aún, estos sistemas alternativos serán mayormente híbridos con un MCI como principal fuente de potencia.

Por otra parte, la disponibilidad de combustibles fósiles se reduce continuamente. Esto impulsa la necesidad de explorar combustibles no convencionales, entre los cua-

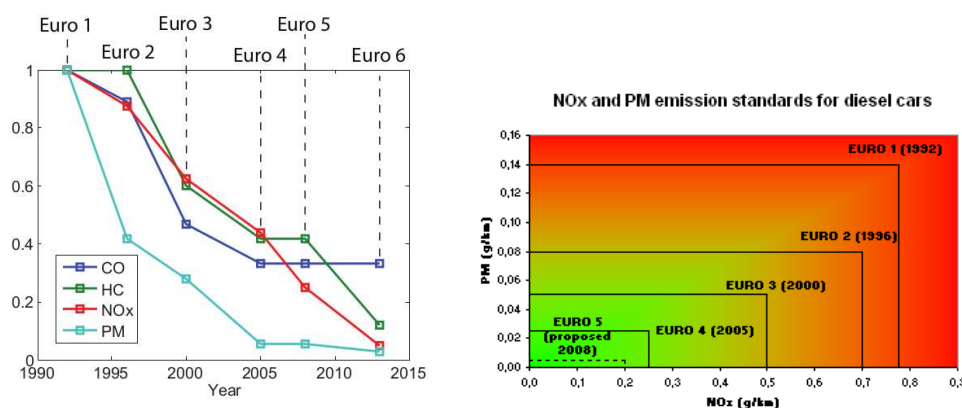


Figura 1.2: Límite de emisiones para vehículos diesel ligeros (izquierda) y pesados (derecha) [g/km] [42, 40].

les se destacan el biodiesel y etanol [162], usualmente agregados a los combustibles convencionales. El hecho de mezclar estos nuevos componentes modifica las propiedades físico-químicas del combustible, generando la necesidad de nuevos diseños que garanticen una buena dosificación del mismo durante la inyección.

Otra de las principales vías de reducción de emisiones es desarrollar modos de Combustión a Bajas Temperaturas (*Low Temperature Combustion*, LTC), en particular regímenes de trabajo de Carga Homogénea Encendida por Compresión (*Homogeneous Charge Compression Ignition*, HCCI) [104].

En estos motores la combustión es más rápida y se desarrolla a temperaturas más bajas, por lo que la emisión de contaminantes es menor. La mezcla empleada contiene tanto nafta como diesel, en precisas proporciones controladas por la electrónica del sistema de inyección.

En consecuencia, el consumo y los requerimientos medioambientales evolucionan a un ritmo cada vez más acelerado, mientras que los recursos energéticos son cada vez escasos. Sin embargo, el desarrollo de motores basado en construcción de prototipos, prueba y error no permiten hallar soluciones a las problemáticas planteadas en los plazos requeridos. Esto exige al sector de transporte acortar el ciclo de desarrollo de nuevas tecnologías para lograr diseños de forma rápida y económica.

1.1.1. Herramientas computacionales para diseño de motores

A fin de llevar a cabo los procesos de diseño de motores de forma eficiente, actualmente se desarrollan herramientas computacionales que reducen significativamente costos y plazos de desarrollo. Esta metodología mejora la competitividad industrial y facilita la autonomía energética de aquellos países que la utilicen.

Los anales del *Workshop PreSICE* [176], identifican dos aspectos vitales en el desarrollo actual de la simulación de MCI: la descripción del *spray* durante la inyección directa y los modelos empleados para representar la combustión.

En ambos casos, la problemática principal radica en la interacción de estos fenómenos con la turbulencia. El alto grado de aleatoriedad presente en el flujo afecta la evolución tanto del mezclado entre aire y combustible como de las reacciones químicas entre ellos.

En su momento, las limitaciones en la comprensión y capacidad de modelado de estos procesos estocásticos se consideró el principal impedimento para el desarrollo de simuladores de motor más precisos. A partir de este diagnóstico, se definieron los siguientes tres objetivos:

- Profundizar el conocimiento sobre los fenómenos fundamentales que ayudarán a establecer y caracterizar las causas físicas de los eventos estocásticos.

- Desarrollar modelos con suficiente precisión y sensibilidad para capturar la variabilidad de las propiedades que limitan la eficiencia de un motor.
- Cuantificar y manejar la incertezas en los parámetros de los modelos y en las condiciones de borde.

Todo lo anterior requiere de un entendimiento de los fenómenos básicos, del desarrollo de modelos de alta confiabilidad y de su rigurosa validación. Estos avances reducirán en gran medida las incertezas de los modelos actuales mejorando el entendimiento de cómo se desarrolla un *spray* a partir de una inyección de combustible, cómo se prepara la mezcla de éste con el aire y cómo luego progresa la combustión.

A su vez, como resultado de este *workshop* se arribó a las siguientes conclusiones:

- La cantidad de información que puede relevarse de una simulación es más abundante que aquella obtenida en un ensayo de laboratorio, por lo que las herramientas computacionales juegan un rol fundamental en analizar la física de estos fenómenos.
- Es necesario aplicar dicho conocimiento en modelos de bajo costo computacional que puedan emplearse como herramientas de diseño en procesos de optimización automáticos (por ejemplo *machine learning*)
- El uso de modelos validados reducirá la necesidad de análisis experimentales, acelerando significativamente el ciclo de desarrollo y reduciendo su costo.

1.1.2. Simulación y modelado de flujos multifásicos turbulentos

La atomización - el proceso de fragmentación por el cual una estructura líquida se descompone en fracciones de menor tamaño dispersándose en una fase gaseosa- es un régimen de flujo multifásico que se desarrolla a altos números de Reynolds. Este tipo de fenómenos está presente en una amplia variedad de problemas de ingeniería (aplicación de agroquímicos, pintura, producción de fármacos) [87] que impulsa el desarrollo de mejores métodos numéricos para la simulación de aerosoles.

La mayor dificultad en la simulación de atomización radica en que es un problema multiescala. Por un lado, la turbulencia en el flujo desarrollan una evolución caótica con variaciones considerables de sus propiedades, tanto en el tiempo como en el espacio [131, 150, 53]. De acuerdo a la teoría de turbulencia desarrollada por Kolmogorov, mayores números de Reynolds implican mayor diferencia entre la escala integral del problema y la microescala disipativa. A su vez, un mayor rango de escalas implica un mayor costo computacional.

Por otra parte, la coexistencia de dos fases implica una complejidad geométrica adicional para representar la discontinuidad de propiedades y los fenómenos de interfase. Más aún, a medida que las dimensiones de la interfase se reducen las fuerzas de tensión superficial se tornan significativas. Este fenómeno es determinante en la dinámica de atomización e involucra longitudes características considerablemente reducidas (longitud capilar) [174]. La simulación de esta escala espacial también implica un aumento en la demanda computacional del problema.

A su vez, como se expuso en la sección 1.1.1, la simulación de un ciclo completo de motor requiere modelos de parámetros concentrados que describan el *spray* con un bajo costo computacional. Los simuladores empleados en la actualidad (KIVA, FIRE, CONVERGE, OpenFOAM) utilizan formulaciones de partículas para representar grupos de gotas evolucionando de acuerdo a modelos estocásticos. Sin embargo, éstos dependen fuertemente de constantes que deben ajustarse para cada caso de estudio. Esta pérdida de generalidad introduce un factor de error que debe salvarse mediante validaciones más exhaustivas.

1.2. Objetivo de la tesis

El fin de esta tesis es desarrollar herramientas para Simulación Numérica Directa (DNS) de flujos multifásicos, adaptándolos luego a un entorno de modelado implícito de turbulencia para simular problemas de atomización con costos computacionales moderados. Estas técnicas son un medio para lograr un conocimiento más profundo sobre la formación de aerosoles a regímenes altamente turbulentos, caracterizando la evolución del *spray* a fin de perfeccionar los modelos a parámetros concentrados que se emplean usualmente para representar la inyección de combustible en motores.

1.3. Metodología

A partir de las herramientas de DNS para flujos multifásicos disponibles en la suite Basilisk, se implementaron utilidades que permiten estimar y acotar el error numérico dentro de rangos preestablecidos preservando el comportamiento físico del fenómeno. Estos indicadores se aplicaron en un algoritmo de Refinamiento Adaptativo de Malla (AMR), realizando simulaciones de atomización de chorros y gotas en condiciones de flujo recurrentes en la bibliografía de referencia.

Posteriormente, se procesaron los resultados mediante análisis estadístico para describir el comportamiento de las poblaciones de gotas generadas. La evolución

de estas parcelas se contrastó con las predicciones de los modelos lagrangianos de atomización en los problemas de atomización secundaria.

1.4. Organización de este documento

La línea de investigación desarrollada en esta tesis tuvo dos grandes áreas de trabajo. Por un lado, se perfeccionaron métodos numéricos para la simulación computacional de flujos multifásicos turbulentos, aplicándolos luego para resolver problemas de atomización con alto grado de detalle. La segunda etapa se centró en resolver problemas de referencia y caracterizarlos analizando la coexistencia de diversos mecanismos de atomización y cómo los mismos determinan las características finales del *spray*.

Respecto a los métodos numéricos empleados, se utilizó un enfoque de Volumen de Fluido (VOF) geométrico, utilizando AMR, programado en la suite Basilisk [134]. En ese marco de trabajo se desarrollaron criterios de refinamiento basados en representación de escalas turbulentas y esquemas de advección consistentes para preservar los fenómenos de transferencia entre fases. A partir de esta herramienta se simulieron dos tipos de problemas: atomización primaria (chorros) y secundaria (gotas). Respecto a la primera, se consideró la inyección de un chorro líquido cilíndrico en diversas condiciones de flujo, delineando los requerimientos computacionales para capturar todas las escalas del problema y estableciendo las características de las gotas generadas en los primeros instantes de inyección. En una segunda instancia de simulación se analizaron gotas individuales en condiciones de flujo análogas a los problemas de atomización primaria para capturar con mayor detalle los fenómenos de atomización secundaria.

El capítulo 2 define las principales variables que determinan los regímenes de atomización y los parámetros con los cuales se valora la calidad de un *spray*. Luego se describe brevemente el proceso de inyección de combustible en motores, su relevancia en cuanto a eficiencia energética e impacto ambiental y el rol de la atomización en la formación de carga.

En el capítulo 3 se definen las ecuaciones de Dinámica de Flujos Multifásicos en un marco general, complementando luego esta formulación con una breve reseña sobre el análisis de flujos turbulentos.

Respecto a la numérica, en el capítulo 4 se describe el Método de Volúmenes Finitos (*Finite Volume Method*, FVM) como técnica de discretización, algunas técnicas de *interface tracking* para la representación de la interfase (con particular énfasis al método VOF) y la implementación de modelos de turbulencia en el marco de simulación a Reynolds elevado. A partir de esta revisión, se diseña una configuración

VOF-AMR con error numérico controlado que se ha empleado en las simulaciones DNS subsiguientes.

El capítulo 5 expone resultados respecto a la atomización de chorros cilíndricos en diversas condiciones de inyección académicas. En cada caso se caracterizan las diferentes zonas de la nube de gotas, identificando cuáles son los mecanismos de fragmentación predominantes y obteniendo estimaciones preliminares de la tasa de atomización.

En el capítulo 6 se analizan problemas simplificados de atomización secundaria, basados en condiciones de flujo equivalentes a la simulación del chorro completo, donde se estudia la evolución de una única gota. Mediante estas simulaciones se obtiene un análisis más detallado del comportamiento individual de cada estructura líquida. Mediante la caracterización de los fenómenos de

Finalmente, las conclusiones generales de la tesis se encuentran en el capítulo 7, junto con un sumario de las perspectivas y el futuro de esta línea de investigación.

1.5. Contribuciones científicas

Los principales resultados de esta tesis son simulaciones de atomización primaria y secundaria de alta precisión, la caracterización de los mecanismos de fragmentación presentes en este tipo de flujos y el uso de dichos datos para ajustar modelos de aerosoles de orden reducido. Por otra parte, se describen en este trabajo los detalles de las técnicas numéricas empleadas. Así, pueden mencionarse los siguientes aportes:

- Se analizó la estabilidad de algoritmos segregados de acoplamiento presión-velocidad para mallas colocadas en el contexto de Método de Volúmenes Finitos.
- Se definieron algunas estrategias de estabilización para mejorar la convergencia del método.
- Se definió una estrategia de refinamiento para aplicar Simulación de Grandes Torbellinos Implícita (*Implicit Large Eddy Simulation*, ILES) en problemas de atomización utilizando mallas *octree*.
- Se caracterizó la atomización de un chorro de combustible en condiciones acordes a un problema de inyección diesel [105, 85, 151]. Se describieron los procesos de fragmentación en función de las características de flujo.
- Se analizó la atomización de una gota en condiciones de flujo análogas al caso de una cámara de combustión. Se caracterizó el proceso de deformación, relacionando los resultados con los datos experimentales de procesos de fragmentación

1.5.1. Publicaciones en Revistas indexadas

- Venier C.M., Pairetti C.I., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *On the stability analysis of the PISO algorithm*. Computers & Fluids vol. 147 p. 25-40. 2017 [182]
- Aguerre H., Pairetti C.I., Venier C.M., Marquez Damian S. y Nigro N.M. *An oscillation-free flow solver based on flux reconstruction*. Journal of Computational Physics. [2]

1.5.2. Publicaciones en Congresos

- Pairetti C, Aguerre H, Márquez Damián S, Nigro N. *Ajuste de un Modelo de Transferencia de Calor 0D/1D para Motores de Combustión Interna mediante el Uso de CFD*. Mecánica Computacional 2014, ENIEF 2014, Instituto Balseiro
- López E, Aguerre H, Pairetti C, Márquez Damián S, Giménez J, Nigro N. *Contrastación De Modelos Para Combustión Premezclada En Aplicaciones De Motores De Combustión Interna*, Jornada de Motores Termicos y Lubricacion MTL 2016, La Plata (UNLP).
- Aguerre H, Pairetti C, Lopez E y Nigro N, *La importancia de la dinámica de mallas en la simulación de motores de combustión interna. Algunas nuevas tendencias*, Jornada de Motores Termicos y Lubricacion, MTL 2016, La Plata (UNLP).
- Lopéz E.J., Aguerre H.J., Pairetti C.I., Nigro. N.M., *Numerical Simulation of Partially Premixed Combustion Using a Flame Surface Density Approach* Mecánica Computacional Vol XXXV pp. 887-906, ENIEF 2017, La Plata (UNLP).
- Pairetti C, Popinet S, Márquez Damián S, Nigro N, Zaleski S. *Bag Mode Breakup Simulations Of A Single Liquid Droplet*. ECCM-ECFD 2018, ECCOMAS 25th, Glasgow
- Pairetti C, Popinet S, Márquez Damián S, Nigro N, Zaleski S. *Simulación VOF-AMR de atomización de combustible*. II Jornada de Motores Térmicos y Lubricantes, MTL 2018, Santa Fe (Primer premio en concurso de pósters)
- Pairetti C, Popinet S, Márquez Damián S, Nigro N, Zaleski S. *Simulación De Atomización Mediante VOFAMR*. Mecánica Computacional vol. p. . 2018, MECOM 2018, Tucumán

- Boscarol L., Pairetti C, Rodríguez G, López E, Giménez S, Nigro N. *Optimización de motores de combustión mediante un simulador de parámetros concentrados*. CAIM 2018, Tucumán

1.5.3. Otras participaciones en Congresos

- Marquez Damian S., Pairetti C. , Nigro N., *Implementation of a Geometrical Reconstruction Interphase Algorithm Over OpenFOAM®* , Mecánica Computacional Vol XXXIV, ENIEF 2016, UTN-Córdoba.
- Pairetti C. , Marquez Damian S., Giménez J., Nigro N., *Application of the Volume of Fluid Technique on Atomization Simulations*, Mecánica Computacional Vol XXXIV, ENIEF 2016, UTN-Córdoba.
- Venier C., Pairetti C. , Marquez Damian S., Nigro N., *Fourier Stability Analysis Applied to Navier-Stokes Segregated Algorithms*, Mecánica Computacional Vol XXXIV, ENIEF 2016, UTN-Córdoba.
- Venier C., Marquez Damian S., Pairetti C. , Nigro N., *Estabilidad De Técnicas De Acoplamiento Tipo PISO a 1 y 2 Fases por el Método De Fourier* , Mecánica Computacional Vol XXXV, ENIEF 2017, La Plata (UNLP)
- Márquez Damián S., Pairetti C. I., Nigro. N.M. *Parallel Implementation of a Geometrical Reconstruction Interface Algorithm Over OpenFOAM®* , Mecánica Computacional Vol XXXV, ENIEF 2017, La Plata (UNLP)
- Pairetti C, Popinet S, Márquez Damián S, Nigro N, Zaleski S., *Direct Numerical Simulations of a Single Drop in Bag Mode Break-Up* Mecánica Computacional Vol XXXV, ENIEF 2017, La Plata (UNLP)
- Pairetti C, Márquez Damián S, Nigro N. *On the Error Analysis for Geometrical Volume of Fluid Methods*, Mecánica Computacional Vol XXXV, ENIEF 2017, La Plata (UNLP)
- Aguerre H, Pairetti C, López E J, Márquez Damián S, Gimenez J M, Nigro N M *Modelización De La Inyección Directa en Motores De Combustión Interna Usando Una Formulación Euleriana-Lagrangiana*, Mecánica Computacional Vol XXXV, ENIEF 2017, La Plata (UNLP)
- Nigro N. *et al. OpenFOAM developments around fuel injection in internal combustion engines*, Lecture in 5th OpenFOAM User Conference 2017, Wiesbaden, Alemania, del Octubre 2017.

Capítulo 2

Atomización e inyección

La formación de la carga en un motor de combustión es un proceso complejo que involucra diversos fenómenos [10]. A partir de la inyección de combustible, se produce la fragmentación de la masa líquida en estructuras más pequeñas hasta formar una nube de gotas. Dicho proceso, conocido como atomización, determina la distribución espacial del combustible y la superficie de contacto gas-líquido. A medida que se desarrolla la inyección, las gotas se evaporan formando la mezcla aire-combustible que se distribuirá en la cámara de combustión. Todo este proceso es fundamental para asegurar la calidad de combustión y, por lo tanto, la eficiencia del motor.

Durante la atomización del chorro, la interfase se deforma hasta fragmentarse produciendo el desprendimiento de filamentos y gotas que posteriormente se descomponen hasta formar el aerosol. Este proceso puede estudiarse en términos de inestabilidades hidrodinámicas, estimando las tasas de deformación en función de las propiedades de los fluidos y las condiciones de flujo. Esta caracterización de los mecanismos de atomización permite aproximar *a priori* ciertas características globales del *spray*.

En este capítulo se analizan cuáles son los parámetros de inyección que afecta la atomización y cómo éstos determinan las propiedades del aerosol generado. Finalmente, se describen los modelos de atomización utilizados usualmente para la representación de la inyección en una simulación CFD de motor, dando especial énfasis a los modelos de atomización.

2.1. Dinámica de chorros líquidos cilíndricos

Un *jet* o chorro puede definirse como “*un haz colimado de materia*” [38]. Esta amplia definición no distingue entre estados de la materia ni sección de la geometría; no obstante, el estudio de estos sistemas históricamente se ha centrado en aquellos casos

que involucran el movimiento de un líquido penetrando en aire [187, 161, 25, 63, 103]. Los chorros existen en una amplia variedad de contextos y escalas, ya sea en la naturaleza como en el ámbito industrial (aplicación de agroquímicos, recubrimientos ó pinturas, procesos de secado o enfriado e inyección de combustible en motores). Uno de los fenómenos más relevantes en la evolución de chorros es la fragmentación o *breakup* de la columna principal en estructuras de menor tamaño.

En este contexto, se llama *mecanismos de fragmentación* a los fenómenos dinámicos que deforman la interfase y eventualmente conducen a la ruptura de las estructuras líquidas. Así, la evolución de un chorro depende de *inestabilidades hidrodinámicas* en su superficie, que crecen o se mantienen estables dependiendo de la relación las fuerzas de tensión superficial y los efectos inerciales, viscosos, de las fuerzas de acción a distancia (por ejemplo gravedad o electrostática).

2.1.1. Revisión histórica: estudio de la fragmentación de chorros

La tensión superficial es un elemento clave para comprender la fragmentación de chorros líquidos. Durante el renacimiento, Da Vinci documentó la presencia de una fuerza cohesiva en la superficie del agua que compite con la gravedad en la formación de gotas [29].

No fue hasta inicios del siglo XIX que Laplace [83] y Young [195], entre 1804 y 1805, observaron la relación entre las fuerzas de interfase y su radio de curvatura. Bajo este concepto se deduce que la fuerza de tensión superficial tiende a minimizar la energía de superficie reduciendo el área de la interfase. Esto implica, a su vez, que la tensión superficial acelera la fragmentación en los extremos de ligamentos cilíndricos, fenómeno conocido como *pinch-off* [38].

Luego Savart [153], en 1833, estudió experimentalmente la fragmentación de láminas líquidas planas. En particular observó que, independientemente de la dirección del flujo respecto a la gravedad, se producían ondulaciones en la lámina que eventualmente la fragmentaban en gotas más pequeñas. Así, Savart postuló que la fuerza f^σ es proporcional al espesor o radio de chorro (h) e inversamente proporcional a la caída de presión (Δp). La ecuación de Bernoulli, establece luego la relación entre velocidad y presión ($v \propto \sqrt{\Delta p}$) que permite finalmente asociar las observaciones de Savart con fenómenos de propagación de ondas. Fue Plateau [130] quien profundizó el estudio sobre la resonancia de las ondulaciones y finalmente Rayleigh [141] quien, en 1879, las describió mediante análisis de estabilidad lineal, dando sustento matemático a las observaciones experimentales desarrolladas durante el siglo XIX. Sin embargo, al crecer las ondulaciones los efectos no lineales se tornan significativos y la teoría de Rayleigh pierde validez, especialmente en los instantes previos al *breakup*.

No fue hasta mediados del siglo XX que los desarrollos experimentales, impulsados por las aplicaciones aeronáuticas y automotrices, permitieron un estudio más detallado de la fragmentación de chorros. El uso de cámaras de alta velocidad y dispositivos experimentales más avanzados permitió una medición más precisa de los tamaños de gotas y su dispersión. De esta manera, los nuevos datos experimentales impulsaron la extensión del análisis de estabilidad para considerar los fenómenos no lineales, la viscosidad y el efecto de fuerzas externas (*e. g.* electrostática) [25, 139, 6, 157, 174, 37].

2.1.2. Análisis de estabilidad y estimación del tiempo de *breakup*

Los análisis de estabilidad lineal se basan en considerar la interfase puede ubicarse en términos de una posición de equilibrio $y_0(x)$ y una función de onda $A(x, t)$,

$$A(x, t) = A_0 e^{(ikx + i\omega t)} \rightarrow y(x, t) = y_0(x) + A(x, t), \quad (2.1)$$

donde $k = 2\pi/\lambda$ y $\omega = 2\pi f$ son el número de onda y la frecuencia angular de la onda. La Figura 2.1 (a) muestra un ejemplo de inestabilidad hidrodinámica sometida a una fuerza de cuerpo y a un flujo dado.

Luego, introduciendo la expresión (2.1) en el balance de momento (*e. g.* ecuaciones de Euler o Navier-Stokes) puede obtenerse una función dispersión $\omega(k)$, dependiente a su vez de la geometría, las condiciones de flujo y las propiedades de cada fase. Así, si $-\mathcal{J}(\omega(k)) = \gamma(k) > 0$, la amplitud de la onda será creciente. Conocido este valor puede estimarse el tiempo del crecimiento,

$$A_{max}(t) = A_0 e^{\gamma(k)t} \rightarrow t = \frac{1}{\gamma(k)} \ln \left(\frac{A}{A_0} \right). \quad (2.2)$$

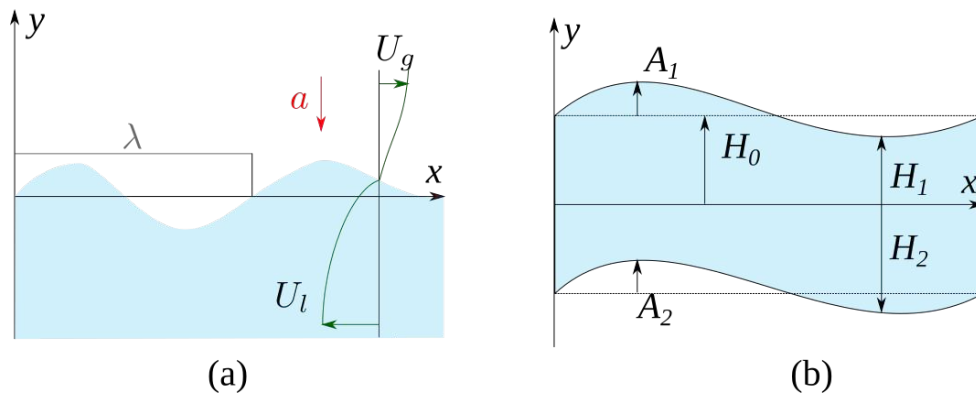


Figura 2.1: Inestabilidad en interfase única (a) y análisis de una lámina delgada (b)

Esta metodología se ha utilizado ampliamente a lo largo del tiempo para caracterizar la evolución de inestabilidades para condiciones particulares de flujo. La llamada inestabilidad de Rayleigh-Taylor (RTI), por ejemplo, se desarrolla cuando dos fases son aceleradas (*e. g.* por la gravedad) en la dirección normal a la superficie con sentido hacia el fluido más ligero [140, 158]. La inestabilidad de Kelvin-Helmholtz (KHI) se desarrolla cuando, en cambio, existe una velocidad relativa que provoca un esfuerzo de corte [174, 101]. En ligamentos cilíndricos y chorros de baja velocidad, inestabilidad de Plateau-Rayleigh (PRI) produce una reducción de la sección por ondulaciones axi-simétricas que eventualmente conducen al desprendimiento de gotas en los extremos del chorro [127, 37].

Todos estos fenómenos son expresiones particulares de la dinámica de flujos multifásicos. Más aún, las descripciones para cada inestabilidad sólo son válidas para geometrías sencillas y no pueden extenderse con facilidad para describir las instancias de grandes deformaciones, en especial los procesos de fragmentación.

En este contexto, los análisis de estabilidad lineal son herramientas útiles para determinar las condiciones de flujo que producen inestabilidades, pero no pueden predecir cuantitativamente las características del *breakup*.

2.1.3. Clasificación de regímenes de fragmentación

La bibliografía actual usualmente distingue cuatro regímenes de *breakup*: el régimen Rayleigh, los modos inducidos por viento (primer y segundo modo) y finalmente la atomización [10, 38, 87, 136, 143].

Esta descripción fue desarrollada por Ohnesorge en 1931 [111], quien realizó experimentos a partir de los cuales demostró que la desintegración del chorro puede describirse en función de los números de Weber y Reynolds. Asimismo, Ohnesorge creó un grupo adimensional (Z) independiente de la velocidad. Los tres parámetros pueden también interpretarse como un cociente de tiempos característicos relacionados a los fenómenos de flujo gobernados por los efectos inerciales o las fuerzas de tensión superficial ó viscosidad.

$$\text{Re}_l = \frac{t_v}{t_c} = \frac{\rho_l U L}{\mu_l} \quad \text{We}_l = \frac{t_s}{t_c} = \frac{\rho_l U^2 L}{\sigma} \quad Z = \frac{t_s}{t_v} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l \sigma L}} \quad (2.3)$$

donde t_c , t_s , t_v son los tiempos característicos de convección, tensión superficial y viscosidad respectivamente. Así, el fenómeno con el tiempo característico más corto será el que domine la dinámica del proceso porque actuará más rápidamente que el resto.

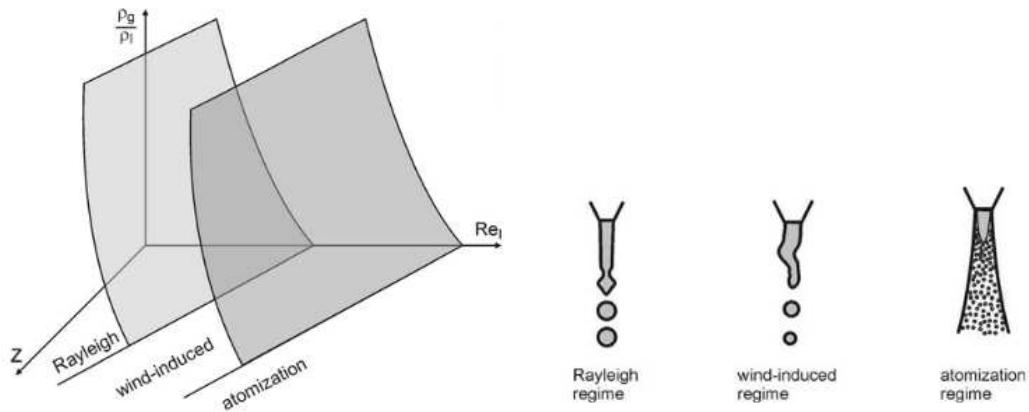


Figura 2.2: Separación de regímenes de atomización (izquierda) y representación esquemática (derecha) [10]

Sin embargo, esta descripción no tiene en cuenta las propiedades de la fase gaseosa. Una descripción adimensional más completa de las condiciones de flujo se logra entonces considerando los cocientes entre las densidades y viscosidades de cada fase, siendo la relación de densidades el parámetro de mayor influencia.

$$\rho^* = \frac{\rho_l}{\rho_g} \quad \mu^* = \frac{\mu_l}{\mu_g} \quad (2.4)$$

Incluyendo este parámetro, Reitz [143] realiza una separación de regímenes basado en ρ^* , Re_l y Z , como se muestra en Figura 2.2.

En un contexto de laboratorio, considerando una boquilla que inyecta un líquido con propiedades constantes, el aumento de velocidad (U) provoca la transiciones entre los regímenes de fragmentación fotografiados en la Figura 2.3, donde también se representa la *longitud de breakup* (L_{bu}), es decir, la distancia a la cual el chorro pierde coherencia. A grandes rasgos, las características de cada régimen son las siguientes:

Régimen Rayleigh (AB): a bajas velocidades, la energía cinética del líquido es reducida y, al interactuar con la tensión superficial, provoca perturbaciones axisimétricas de gran longitud de onda en la interfase. Estas ondas se propagan y amplifican hasta generar el desprendimiento de una gota de diámetro mayor al chorro. A medida que la gota crece, se genera un angostamiento entre ella y el resto del chorro, que reduce su sección hasta provocar el desprendimiento. Este fenómeno se conoce como *pinch-off* y está asociado a longitudes de onda largas, estudiadas en los trabajos de Rayleigh [140].

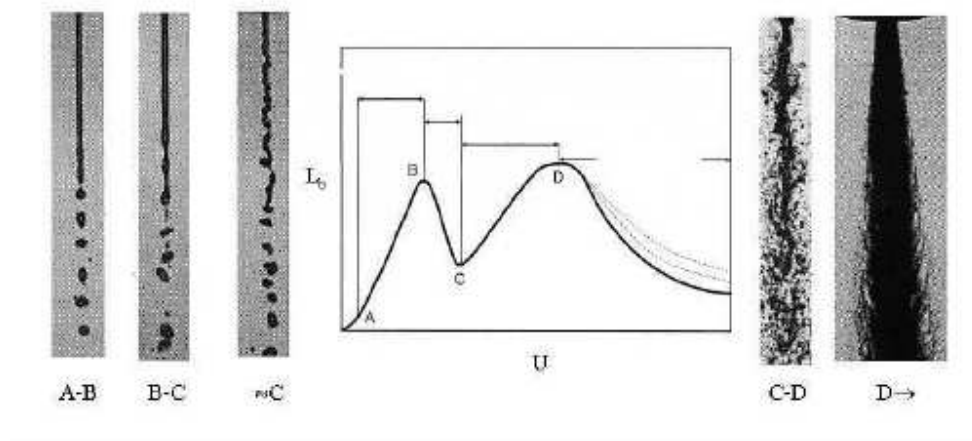


Figura 2.3: Regímenes de atomización [136]

Modos inducidos por viento(BC, CD): al aumentar la velocidad, las fuerzas aerodinámicas producen perturbaciones de onda corta en la interfase. Esto provoca un crecimiento de las ondulaciones en la superficie que eventualmente produce el desprendimiento de gotas de menor tamaño. El efecto aerodinámico se intensifica cuando la velocidad aumenta, reduciendo la longitud de *breakup* L_{bu} y el diámetro de las gotas desprendidas. La transición al segundo modo inducido por viento (CD) está marcada por el desarrollo de la turbulencia dentro de la boquilla. Cuando se alcanza este régimen, el chorro pierde simetría axial. Las deformaciones asimétricas generan desprendimiento de gotas más pequeñas en toda la superficie del chorro. Ambos regímenes son descritos por Weber en 1931 [187, 136].

Atomización (D-): cuando la velocidad de inyección es lo suficientemente alta como para lograr un flujo turbulento totalmente desarrollado dentro de la boquilla. La longitud de onda característica de las inestabilidades pasa a ser considerablemente menor que el diámetro del inyector. El desprendimiento de gotas ocurre tan rápidamente que erosiona toda la superficie del chorro, como se muestra en la Figura 2.4.

A partir de datos experimentales, en condiciones con transferencia de masa y energía mínima, Faeth *et. al.* [43] describen la atomización distinguiendo dos etapas: primaria y secundaria. La fragmentación primaria consiste en la descomposición del núcleo líquido y genera la región densa del *spray*, con gotas y ligamentos de gran tamaño. Más allá de la longitud de *breakup*, se encuentra la zona diluida; en esta región transcurre la atomización secundaria, donde las estructuras desprendidas del núcleo se fragmentan en gotas estables, más pequeñas y dispersas entre sí.

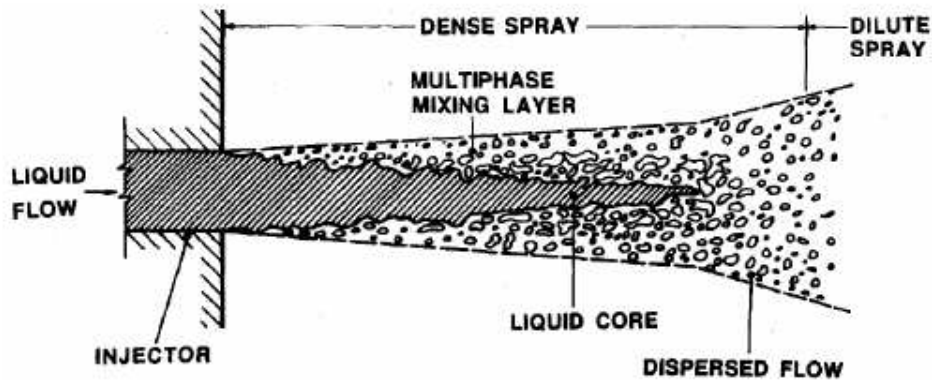


Figura 2.4: Regiones de atomización en un chorro cilíndrico según Faeth *et. al.* [43].

2.2. Inyección de combustible en motores

El sistema de distribución de combustible en un motor es tal vez el elemento de control con mayor influencia en su eficiencia e impacto ambiental. Más aún, la necesidad de regular con precisión las propiedades de la mezcla aire-combustible dentro de un mismo ciclo de operación ha tenido como consecuencia un uso masivo de sistemas de inyección directa que permiten controlar las características del *spray* actuando sobre los parámetros de inyección, principalmente la presión de combustible, el comienzo y la duración de la inyección. Asimismo, para cada aplicación particular (por ejemplo, motores Diesel u Otto, turbinas de avión) existe una gran variedad de diseños que produce aerosoles de diversas geometrías, con distribuciones y tamaños de gota específicos para la aplicación de interés. Una descripción más detallada de las características distintivas de estas tecnologías puede encontrarse en [10, 87]. Las secciones siguientes están enfocadas en el caso más simple y difundido: los inyectores de orificio cilíndrico.

Por otra parte, es importante considerar que la inyección de combustible en una cámara de combustión se desarrolla a regímenes compresibles y a altas temperaturas, lo que implica la presencia de otros fenómenos, como la cavitación y la evaporación, que interactúan con la atomización elevando la complejidad del problema. Aún en este contexto, los fenómenos inerciales y de tensión superficial descritos en las secciones anteriores son determinantes en el tamaño y la distribución de gotas en el aerosol [38, 136, 87].

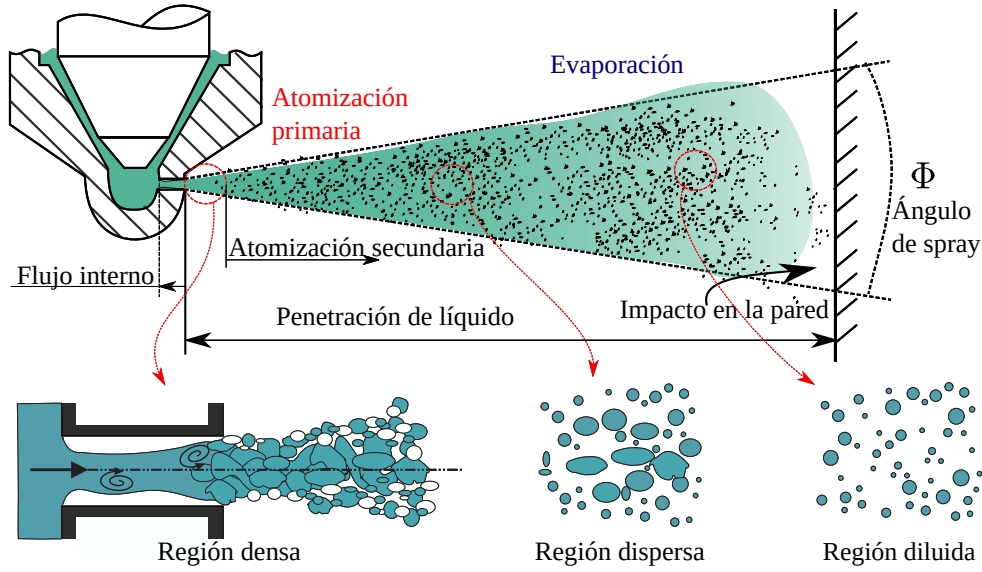


Figura 2.5: Instancias del proceso de inyección, adaptado de [10]

2.2.1. Formación de carga en el cilindro

La Figura 2.5 es un esquema que representa la formación de la mezcla aire-combustible para un diseño de inyector simple, con un único orificio. En la Tabla 2.1 se listan las propiedades y variables de operación típicas para inyectores Diesel en vehículos de pasajeros modernos.

Al elevarse la aguja dentro del inyector se desarrolla, por diferencia de presión, el flujo interno de combustible en el saco y a lo largo del orificio de inyección. En la sección de salida, el chorro penetra en la cámara de combustión y comienza la interacción con el aire del cilindro. La atomización primaria se produce a partir de la boquilla, como se describió en las secciones anteriores, generando una rápida erosión del chorro. La región densa se extiende hasta una distancia L_{bu} , remarcada en la Figura 2.4, a partir de la cual el combustible se encuentra totalmente descompuesto en gotas. Esta longitud es difícil de establecer aún en condiciones de laboratorio. Los análisis experimentales proponen expresiones como la Ecuación (2.5), pero la constante de ajuste (C_{bu}) presenta una alta variabilidad con la geometría del inyector [58]. La longitud L_{bu} es importante para definir la orientación de los orificios de inyección, a fin de evitar la colisión del chorro con cualquier superficie sólida.

$$L_{bu} = C_{bu} D_{inj} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}} \quad (3 < C_{bu} < 10) \quad (2.5)$$

Las gotas y ligamentos desprendidos del chorro sufren luego la atomización secundaria en la zona dispersa, fragmentándose en gotas más pequeñas. En esta región, debido al aumento de la superficie de interfase, se acelera el intercambio de calor, el

combustible eleva su temperatura y se evapora. A medida que el aerosol penetra en la cámara de combustión, las gotas reducen su diámetro y se alejan entre sí, distribuyendo el líquido en un espacio mayor y formando la región diluida del *spray* donde la concentración de líquido es mínima.

Durante todo este proceso, el flujo residual de gas en el cilindro arrastra al combustible, líquido y evaporado, transportándolo en la cámara de combustión en función de su geometría. Dicho fenómeno tiene poca relevancia en la región de atomización primaria, pero afecta significativamente la zona dispersa. A su vez, el momento lineal del combustible inyectado a alta velocidad contribuye a este proceso de mezcla.

Dependiendo de la aplicación, la carga deberá ser homogénea o tener mayores concentraciones en una localización particular (por ejemplo, cerca de la bujía en los motores de ignición inducida por chispa). Por otra parte, si la temperatura en el cilindro no es lo suficientemente alta o la velocidad de inyección es demasiado elevada, puede suceder que parte del combustible líquido alcance la pared y se acumule en ella (*wall impingement*), reduciendo la eficiencia del motor.

En este contexto, el inyector a emplear debe estar diseñado para lograr una penetración suficiente para llenar el cilindro sin alcanzar las paredes. Existen varias expresiones para estimar la penetración del *spray* en el tiempo, basadas en estudios experimentales. Dent [30], propone la siguiente expresión.

$$S = 3,07 \left(\frac{\Delta p}{\rho_g} \right)^{0,25} (t D_{inj})^{0,5} \left(\frac{294}{T_g} \right)^{0,25}, \quad (2.6)$$

donde S es la penetración, Δp es la diferencia de presión entre el combustible y el gas en el cilindro, t es el tiempo de inyección y D_{inj} el diámetro del inyector; ρ_g y T_g son la densidad y temperatura del gas respectivamente. Cabe notar que esta expresión, cuyas constantes se han ajustado a partir de datos experimentales, considera principalmente los efectos de arrastre y evaporación sobre el aerosol.

Otro factor importante es el ángulo del cono desarrollado. Si bien la mayoría de la masa líquida se concentra en la línea del eje del orificio de inyección, la distribución

D_{inj}	80 – 200 μm	ρ_g	20 – 25 kg/m^3
L_{inj}	100 – 200 μm	ρ_l	600 – 800 kg/m^3
p_{inj}	50 – 200 bar	μ_g	$2. \times 10^{-5} \text{ kg/(ms)}^3$
U_{inj}	100 – 500 m/s	μ_l	$1. - 3. \times 10^{-3} \text{ kg/(ms)}^3$
t_{inj}	$\approx 1 \text{ ms}$	σ	0,025 – 0,06 kg/m/s^2

Cuadro 2.1: Parámetros típicos de inyección Diesel [10].

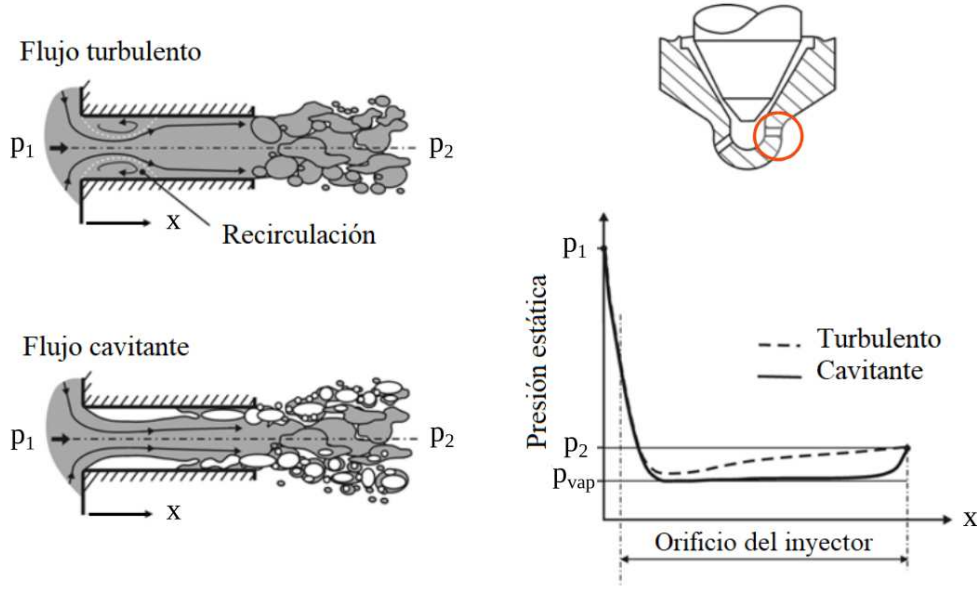


Figura 2.6: Desarrollo de flujo turbulento y cavitante en la boquilla, en función de la diferencia de presiones, adaptado de [10].

del vapor mejora cuando las gotas se proyectan con un cono amplio. Heywood [57] propone la expresión siguiente para dicho ángulo.

$$\tan \Phi/2 = \frac{4\pi}{3. + 0,28(L_{inj}/D_{inj})} \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{0,5} \frac{\sqrt{3}}{6} [1 - \exp(-10\gamma)] \quad (2.7)$$

$$\gamma = \left(\frac{Re_l}{We_l} \right)^2 \frac{\rho_l}{\rho_g}$$

donde L_{inj} es la longitud del orificio de inyección. El resto de los parámetros están directamente relacionados con el análisis de atomización desarrollado por Reitz [143].

Por otra parte, Hiroyasu y Arai [58] proponen la siguiente fórmula:

$$\Phi = 83,5 \left(\frac{L_{inj}}{D_{inj}} \right)^{-0,22} \left(\frac{D_{inj}}{D_s} \right)^{0,15}, \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} \right)^{0,26}, \quad (2.8)$$

donde se considera el diámetro de la *vena contracta* (D_s), que se desarrolla en el ingreso al orificio del inyector. El flujo interno en la boquilla presenta a su vez otro elemento de complejidad: puede desarrollar cavitación. La Figura 2.6 muestra cómo para ciertas condiciones de flujo la elevada velocidad en el orificio puede reducir la presión hasta desarrollar cavitación dentro del inyector. Estos dos efectos así como la expansión abrupta hacia la cámara del combustión contribuyen a generar perturbaciones que se acoplan al desarrollo de la turbulencia y aceleran la fragmentación primaria de la inyección, además de producir un cono más amplio.

La cavitación genera burbujas de vapor que inducen deformaciones más repentinas en la superficie, acelerando la formación y crecimiento de inestabilidades. Contemplando estos efectos Hiroyasu y Arai [58] proponen una fórmula más completa para la longitud de *breakup*,

$$L_{bu} = 7D_{inj} \left(1 + 0,4 \frac{r}{D_{inj}} \right) \left(\frac{p_g}{\rho_l u^2} \right)^{0,05} \left(\frac{L_{inj}}{D_{inj}} \right)^{0,13} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}. \quad (2.9)$$

Esta expresión prescinde de la constante de ajuste, reemplazándola por factores geométricos (que involucra el radio de redondeo r) y un término que cuantifica la posibilidad de desarrollar cavitación (en función de la presión de gas p_g y la velocidad inicial del chorro u).

Por otra parte, además de la distribución espacial del líquido, la atomización busca incrementar el área de interfase para acelerar la tasa de evaporación. Una variable que cuantifica la densidad volumétrica de área es el Diámetro Medio de Sauter (*Sauter Mean Diameter*, SMD ó \overline{D}_{32} ¹) que se define como el diámetro de una gota esférica con la misma relación área/volumen,

$$\left(\frac{V}{A} \right)_{spray} = \frac{\sum (\pi/6) D_{32}^3}{\sum \pi D_{32}^2} \rightarrow \overline{D}_{32} = 6 \left(\frac{V}{A} \right), \quad (2.10)$$

donde D_{32} corresponde al diámetro de Sauter calculado para una única gota mientras que \overline{D}_{32} es el valor medio correspondiente a todo el *spray*.

Es decir, un *spray* con mayor densidad volumétrica de área tendrá un \overline{D}_{32} menor. Hiroyasu y Arai también desarrollaron una expresión para el \overline{D}_{32} medio de un *spray* desarrollado [58]:

$$\frac{\overline{D}_{32}}{D_{inj}} = 0,38 \text{Re}_l^{0,25} \text{We}_l^{-0,32} \left(\frac{\mu_l}{\mu_g} \right)^{0,37} \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} \right)^{-0,47} \quad (2.11)$$

Como en los casos anteriores, estas relaciones se construyen mediante el ajuste de un grupo adimensional relevante utilizando datos experimentales con cierto grado de dispersión y poca variabilidad de los casos. Si bien estas fórmulas son un buen punto de partida para estimar *a priori* las principales dimensiones del *spray* inyectado, no son aplicables en el proceso de diseño de un inyector. Esto implica que el desarrollo de nuevas tecnologías depende aún fuertemente de análisis experimentales y herramientas computacionales de diseño.

¹Baumgarten [10] emplea la notación SMD cuando se refiere a la propiedad del aerosol. Para el caso de una única gota el diámetro equivalente de V/A se nota D_{32} , en función de los índices dimensionales de las magnitudes empleadas

Por otra parte, las expresiones en esta sección se ajustan a la evolución del *spray* en condiciones de laboratorio. Para evaluar la calidad de la mezcla aire combustible en un motor determinado es necesario modelar la interacción entre las gotas de combustible y el flujo de aire en el cilindro. Este paradigma de simulación se aborda en la sección siguiente.

2.3. Modelos de inyección en CFD de motores

La Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) es el conjunto de técnicas numéricas empleadas para resolver problemas de transporte mediante simulaciones computacionales [183].

En el caso concreto de la simulación de motores, es necesario representar una gran cantidad de fenómenos acoplados. En primera instancia, la formación de la carga en el cilindro se desarrolla a partir del flujo de aire, compresible y turbulento, que se mezcla con el combustible líquido, intercambiando masa y energía. Una vez formada la mezcla aire combustible, se desarrolla la combustión, un proceso químico que afecta el desarrollo dinámico del flujo y la transferencia de energía.

Estos fenómenos de transporte pueden representarse con una formulación matemática común, resolviendo las ecuaciones resultantes mediante diversos métodos numéricos. El marco teórico general y las técnicas numéricas empleadas en esta tesis serán descriptas rigurosamente en los capítulos 3 y 4.

La representación de la inyección y formación del *spray*, en cambio, usualmente emplea modelos estocásticos en un marco de dinámica de partículas que representan parcelas de gotas. Esta estrategia de modelado es conocida como *Discrete Parcel Model* (DPM).

En esta sección se describen los lineamientos generales de la técnica y los principales modelos para representar la atomización y posterior evolución del combustible.

2.3.1. Concepto de parcela y partícula

Una partícula es una porción de materia (en este caso, de combustible líquido) que puede representarse mediante un punto material al cual se le asigna un conjunto de propiedades y un único valor de cada una.

Los modelos Lagrangianos representan un fluido como un conjunto de partículas. Esta estrategia es especialmente apropiada para aquellos flujos donde la fase de interés se encuentre dispersa en forma de gotas o burbujas. En este contexto, puede modelarse cada estructura dispersa como una partícula, asignándole tamaño, posición, velocidad y temperatura.

Si bien esta estrategia permite una descripción minuciosa de la nube de gotas, el costo computacional de un modelo Lagrangiano es directamente proporcional a la cantidad de partículas utilizadas. Durante la inyección de combustible el número de gotas es muy elevado (orden de magnitud de 10^8). Por lo tanto, representar cada gota por medio de una partícula implica un costo computacional demasiado alto.

Una manera de reducir los grados de libertad del problema es agrupar las gotas en conjuntos denominados *parcelas*, siendo cada una representada por una partícula. Esta simplificación es válida si las gotas representadas tienen propiedades similares y se encuentran cercanas en el espacio.

De esta manera, puede definirse una parcela \hat{p}_i como $N_{\hat{p}_i}$ partículas idénticas, calculando sus propiedades extensivas como,

$$\rho(\hat{p}_i) \psi(\hat{p}_i) = \sum_{p_i \in \hat{p}_i} \rho(p_i) \psi(p_i) = N_{\hat{p}_i} \rho(p_i) \psi(p_i), \quad (2.12)$$

donde ρ es la densidad del líquido en la parcela y $\psi(p_i)$ es el valor de la propiedad para cada partícula de la parcela.

En general, la fase dispersa representada por las parcelas interactúa con una fase continua (gotas de combustible con el aire) mediante fenómenos de transferencia que definen las derivadas temporales de las propiedades de cada partícula. Estos modelos de transferencia se extienden a las parcelas de forma lineal,

$$\frac{d \psi_n(\hat{p}_i)}{dt} = N_{\hat{p}_i} \frac{d \psi_n(p_i)}{dt}. \quad (2.13)$$

2.3.2. Acoplamiento entre fases continua y dispersa

En este contexto, el combustible inyectado será representado por parcelas, cada una con $N_{\hat{p}_i}$ gotas que compartirán las mismas propiedades. A su vez, la interacción entre el combustible y el aire estará totalmente definida por la transferencia de momento, masa y energía. Así, podemos notar a la parcela como,

$$\hat{p}_i(d, m, \mathbf{x}, \mathbf{u}, \rho_l, \mu_l, T) : N_{p_i} p_i \quad (2.14)$$

siendo las variables intensivas de interés para cada parcela su diámetro de gota (d), masa (m), posición y velocidad (\mathbf{x} y \mathbf{u}), temperatura (T) y las propiedades del líquido (ρ_l y μ_l). La posición y velocidad corresponderán al centro de masa de la nube. La masa y el diámetro se supondrán iguales para todas las gotas, al igual que todas las propiedades intensivas.

Cinemática de las parcelas e intercambio de cantidad de movimiento

La descripción del movimiento de las parcelas se determina por medio de la segunda ley de Newton,

$$\frac{d^2(x_{\hat{p}_i})}{dt^2} = \frac{F_{\hat{p}_i}}{m_{\hat{p}_i}}, \quad (2.15)$$

donde $x_{\hat{p}_i}$ es la posición de la parcela y $F_{\hat{p}_i}$ es la fuerza actuante sobre esta. La Ecuación (2.15) se integra de forma explícita,

$$\mathbf{x}_{\hat{p}_i}^{(n)} = \mathbf{x}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} + \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} \Delta t, \quad (2.16)$$

donde n y $n - 1$ indican instantes de tiempo sucesivos. La velocidad se calcula,

$$\mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} = \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-2)} + \left(\frac{\mathbf{F}_{\hat{p}_i}}{m_{\hat{p}_i}} \right)^{(n-1)} \Delta t. \quad (2.17)$$

La fuerza sobre la parcela se calcula como el arrastre producido por el efecto aerodinámico de la fase continua, cuya velocidad \mathbf{U}_a es conocida. La expresión para la fuerza de arrastre a tiempo $t^{(n-1)}$ es,

$$\mathbf{F}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} = \frac{1}{2} C_d A_{\hat{p}_i} \left[\mathbf{U}_a^{(n-1)} - \mathbf{u}_{\hat{p}_i}^{(n-1)} \right]^2, \quad (2.18)$$

donde C_d es el coeficiente de arrastre y $A_{\hat{p}_i}$ el área transversal de la parcela. A partir de estos lineamientos generales, el modelo puede profundizarse para considerar el efecto de las parcelas en la fase continua (*two-way coupling*) o considerar cierto grado de deformación y dispersión de las gotas mediante C_d y $A_{\hat{p}_i}$.

Intercambio de masa

Las gotas de combustible se evaporan dentro de la corriente de aire intercambiando masa con la fase líquida. La tasa de evaporación de cada especie depende del gradiente de concentración presente entre las fases. Un posible modelo de evaporación es el propuesto por Spalding [160]:

$$\frac{dm}{dt} = \pi d_l \text{Sh} \rho_s D_{AB} \log(1 + x_r), \quad (2.19)$$

donde d_l es el diámetro de la gota, Sh es el número de Sheerwood, ρ_s es la densidad en la superficie de la gota, D_{AB} es el coeficiente de difusividad binario y x_r es la relación

de fracciones molares. Esta se define como,

$$x_r = \frac{x_s - x_a}{1 - x_s}, \quad (2.20)$$

siendo x_s la fracción molar de vapor de combustible en la superficie de la gota y x_a en la fase continua respectivamente. La fracción molar en la superficie de la gota es igual al cociente de la presión de saturación p_{sat} a la temperatura de la gota T_d y la presión de la fase continua p_a ,

$$x_s = \frac{p_{\text{sat}}(T_d, p_a)}{p_a}. \quad (2.21)$$

La densidad en la superficie del vapor de combustible se calcula por medio de la ley de gases ideales utilizando los valores de presión p_s y temperatura T_s en la superficie de la gota,

$$\rho_s = \frac{p_s}{RT_s}, \quad (2.22)$$

donde R es la constante de gas ideal del vapor de combustible. La presión de saturación del vapor en la superficie de la gota se computa en función de la presión de la fase continua y la temperatura de superficie, la cual se calcula usando la regla de los dos tercios [64] que promedia la temperatura de las fases líquida y continua de la siguiente forma:

$$T_s = \frac{1}{3}T_a + \frac{2}{3}T_d. \quad (2.23)$$

El número de Sheerwood se determina por medio de la correlación de Froessling [46],

$$\text{Sh} = 2 + 0,6\text{Re}^{1/2}\text{Sc}^{1/3}, \quad (2.24)$$

siendo $\text{Sc} = D_{AB}/\nu$ el número de Schmidt calculado como el cociente entre la difusividad y la viscosidad cinemática del aire. De esta manera, el número de Sherwood es el factor que representa la influencia del flujo en la tasa de evaporación

Intercambio de energía

El balance térmico para la gota evaporándose dentro de la fase continua se computa realizando un desacople entre las contribuciones debido al calor latente \dot{Q}_L y el calor sensible \dot{Q}_S ,

$$m(\hat{p}_i) c_p(\hat{p}_i) \frac{dT(\hat{p}_i)}{dt} = \dot{Q}_L(\hat{p}_i) + \dot{Q}_S(\hat{p}_i). \quad (2.25)$$

El flujo de calor latente debido a la masa evaporada Δm_{evap} se calcula como el producto de esta por la diferencia de entalpía entre la fase líquida y gaseosa de acuerdo

a las temperatura de la gota T_d y la presión p_a ,

$$\dot{Q}_L = \dot{m}_{\text{evap}} [h_l(p_a, T_d) - h_g(p_a, T_d)] . \quad (2.26)$$

Por otro lado el calor sensible está dado por,

$$\dot{Q}_S = A_{\hat{p}_i} \kappa_{\hat{p}_i} [T_a - T(\hat{p}_i)] . \quad (2.27)$$

donde T_a es la temperatura de la fase continua y $\kappa_{\hat{p}_i}$ es el coeficiente de conductividad térmica. La Ecuación (2.25) se integra para determinar la nueva temperatura de la parcela,

$$\frac{m(\hat{p}_i) c_p(\hat{p}_i) [T(\hat{p}_i)^n - T(\hat{p}_i)^{n-1}]}{\Delta t} = A_{\hat{p}_i} \kappa_{\hat{p}_i} [T_a^n - T(\hat{p}_i)^n] + \dot{Q}_L^{n-1} . \quad (2.28)$$

De la misma manera que ocurre con la velocidad U_a en la transferencia de momento, puede calcularse la variación de la temperatura de la fase continua T_a a partir de la transferencia de energía con las gotas.

2.4. Modelos de atomización por parcelas

La atomización de combustible se representa en los modelos Lagrangianos mediante la variación del diámetro de gota, utilizando modelos algebraicos basados en análisis teóricos de sistemas simplificados, ajustados empíricamente.

En términos generales, el modelo define la derivada temporal del diámetro característico de la parcela. Dicha tasa de cambio dependerá de las propiedades del fluido, el diámetro actual de la gota y las condiciones del flujo en la fase continua.

$$\frac{d}{dt} d = f(d, U, \rho_l, \mu_l, \rho_g, \mu_g, \sigma) \quad (2.29)$$

A su vez, este modelos computan una masa desprendida m_s que representa las estructuras de tamaño menor a d en la parcela. Cuando m_s alcanza cierto umbral, se crea una *parcela hija* que contiene las estructuras de menor tamaño.

2.4.1. Descripción general

Como fue analizado en las secciones anteriores, el chorro líquido inyectado mantiene coherencia en un núcleo denso hasta una cierta longitud L_{bu} . En esta región cercana a la boquilla, la estructura líquida principal se ve afectada por la turbulencia y

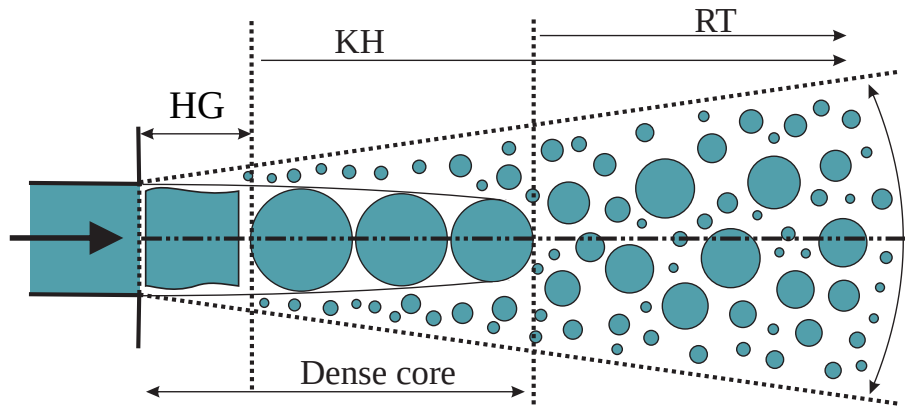


Figura 2.7: Regiones de validez para modelos Kelvin-Helmholtz y Rayleigh-Taylor

la cavitación en el inyector. A partir del desprendimiento de la punta del chorro, los principales efectos de fragmentación derivan del crecimiento de inestabilidades debido a los efectos aerodinámicos.

Los modelos lagrangianos de *sprays* se basan ajustes sobre relaciones obtenidas por teoría de estabilidad lineal que predicen si las gotas serán atomizadas o se mantendrán estables para las condiciones de flujo. En función de las hipótesis adoptadas, los modelos desarrollan expresiones para la tasa desprendimiento m_s y el diámetro de la gota. Algunos modelos, como el propuesto por Huh, Gosman *et. al.* [65, 66], consideran los efectos del flujo en el inyector a fin de obtener mejores predicciones en la zona densa del *spray*.

Como describe Guildenbecher [54], la teoría de inestabilidad lineal invíscida predice que las gotas de $We_g \leq 10$ son estables; esto ha sido verificado experimentalmente [43] para $Z \ll 1$. Así, en el contexto de los modelos DPM, el número de Weber estimado de cada partícula sirve como indicador de la tasa de fragmentación que sufre la masa líquida representada.

En el contexto de la formación de mezcla, aún cuando la parcela haya alcanzado un diámetro estable, seguirá evolucionando afectada por fenómenos de transferencia de masa, momento y energía, perdiendo masa por evaporación hasta desaparecer completamente. Como se analizó al comienzo de este capítulo, las distintas etapas de atomización evolucionan de acuerdo a diversos mecanismos de fragmentación. El esquema en la Figura 2.7 divide las regiones del *spray* en función del mecanismo predominante en cada región.

En el contexto de DPM, la parcela inicial tiene un diámetro y velocidad dados por un modelo de inyección. El llamado *blob-method* desarrollado a partir de los trabajos de Reitz y Diwakar [142, 145], por ejemplo, determina las características de una parcela equivalente en función de la geometría del inyector y las condiciones de

flujo interno. Si bien este modelo contempla la presencia de cavitación y la intensidad de turbulencia en la boquilla, la correcta representación del inyector requiere ajustar constantes mediante datos experimentales.

Luego, a partir de su definición, cada parcela evoluciona reduciendo su diámetro de acuerdo al modelo de atomización utilizado. Los diversos mecanismos de fragmentación poseen una longitud y tiempo característicos, que definirán el tamaño de gota desprendido y la tasa de atomización en función de las condiciones de flujo. Si bien existen modelos basados en un único mecanismo de fragmentación [142, 77], en el contexto de inyecciones a alta velocidad es necesario discriminar los distintos fenómenos para reproducir fielmente la atomización primaria. Esto conduce al uso de modelos híbridos donde se consideran varios mecanismos, calculando la evolución de la superficie en función de la inestabilidad con menor tiempo característico. La estrategia más utilizada es emplear el modelo de Kelvin-Helmholtz (KH), para atomización primaria y el modelo de Rayleigh-Taylor (RT) para atomización secundaria [193, 11].

Si bien el modelo KH representa correctamente los efectos aerodinámicos en la región densa, otros modelos han logrado mayor precisión considerando los efectos del flujo interno en el inyector [194, 86, 175]. Una opción completa que considera los efectos turbulentos en la boquilla es el modelo de Huh-Gosman (HG). Combinando HG con Kelvin-Helmholtz (KH) y Rayleigh-Taylor (RT), se ha diseñado e implementado [1] un método híbrido basados en el trabajo de Li *et al.* [89] y el trabajo de Lucchini *et al.* [98].

2.4.2. Huh-Gosman

El modelo desarrollado por Huh y Gosman [89, 14, 98, 197] propone que las variaciones turbulentas en las cercanías de la boquilla deforman la superficie del chorro produciendo inestabilidades amplificadas por los efectos aerodinámicos del gas. Este proceso se caracteriza mediante una longitud y un tiempo característicos L_A y τ_A respectivamente. Por un lado, L_A depende tanto de la longitud turbulenta L_t como de las perturbaciones en la interfase L_w ,

$$L_A = C_1 L_t \quad L_w = \frac{L_t}{C_2}. \quad (2.30)$$

siendo C_1 y C_2 constantes del modelo, usualmente fijas con valores a 2 y 0,5 respectivamente. El tiempo característico de atomización τ_A se estima como combinación lineal de los tiempos característicos debido a la turbulencia τ_t y la longitud de crecimiento de onda en la superficie τ_w ,

$$\tau_A = C_3 \tau_t + C_4 \tau_w, \quad (2.31)$$

donde $C_3 = 1,2$ y $C_4 = 0,4$. El tiempo característico del crecimiento de perturbaciones en la superficie τ_w corresponde al crecimiento de inestabilidades tipo Kelvin-Helmholtz. Despreciando el efecto de la tensión superficial, se llega a la siguiente expresión:

$$\tau_w = L_w \frac{\sqrt{\rho_l / \rho_g}}{u_r}, \quad (2.32)$$

siendo u_r la velocidad relativa entre la gota y el aire. Una vez determinadas las longitudes y tiempos característicos, se propone la siguiente tasa de cambio del tamaño de la parcela madre,

$$\frac{d(d_l)}{dt} = -2 \frac{L_A}{\tau_A}. \quad (2.33)$$

Por lo tanto, el diámetro futuro puede calcularse como,

$$d_1 = d_0 - 2 \frac{L_A}{\tau_A} (t_1 - t_0), \quad (2.34)$$

donde los subíndices 0 y 1 representan el estado previo y posterior al proceso de atomización. La reducción del tamaño de la gota debido a la Ecuación (2.33) genera una diferencia de masa en la parcela que se acumula a lo largo del tiempo. A esta diferencia se la denomina como la masa despojada m_s ,

$$m_{s1} = m_{s0} + \rho_l \frac{\pi}{6} [d_0^3 - d_1^3]. \quad (2.35)$$

Si la masa despojada supera el 10 % de la masa de la parcela, se produce la atomización de las partículas con un diámetro de la partícula hija definida como $d_h = 2L_A$ y una masa total de la parcela igual a m_s . La cantidad de partículas que contiene la parcela hija se determina por medio de un balance de masa,

$$N_{\hat{p}_h} = \frac{m_{s1}}{\rho_l \frac{\pi}{6} d_h^3}. \quad (2.36)$$

Una vez realizada la atomización se vuelve a cero la masa despojada $m_{s1} = 0$. En el caso de que la masa despojada no alcance el 10 % de la masa de la parcela, la parcela madre no sufre cambios considerando solamente el aumento de la masa despojada.

La longitudes y tiempos turbulentos iniciales se calculan a partir del modelo de turbulencia k - ε ,

$$L_{t_0} = C_\mu \frac{k_0^{1,5}}{\varepsilon_0} \quad \tau_{t_0} = C_\mu \frac{k_0}{\varepsilon_0}, \quad (2.37)$$

donde $C_\mu = 0,09$ es una constante del modelo [98]. Las cantidades turbulentas decaen a lo largo del tiempo una vez que egresan de la boca del inyector. A partir del desarrollo descrito en Baumgarten [10] se llegan a las siguientes funciones en el tiempo para la longitud y tiempo característico de turbulencia:

$$Lt(t) = L_{t_0} \left(1 + \frac{0,0828t}{\tau_{t_0}} \right)^{0,457} \quad \tau_t(t) = \tau_{t_0} + 0,0828t. \quad (2.38)$$

Finalmente, para cerrar el modelo restan definir las cantidades turbulentas k_0 y ε_0 las cuales se determinan haciendo un balance simplificado de pérdida de carga dentro del inyector. En [10] se proponen las siguientes expresiones,

$$k_0 = C_5 \frac{U_i^2}{8L/D}, \quad \varepsilon_0 = C_5 K_e \left(\frac{U_i^3}{2L} \right), \quad (2.39)$$

en donde U_i es la magnitud de la velocidad de salida del líquido en el inyector y C_5 es una constante que depende de las características geométricas del inyector. El valor de K_e usualmente se asume constante (0,27).

El modelo de Huh-Gosman también estima el ángulo de salida del líquido inyectado θ . Se asume que la velocidad transversal del líquido en el punto de salida del inyector es igual al cociente entre la longitud y tiempo de atomización. En combinación con la velocidad de salida U_i se despeja el ángulo de apertura de la inyección por medio de la siguiente expresión:

$$\tan \left(\frac{\theta}{2} \right) = \frac{L_A / \tau_A}{U_i}. \quad (2.40)$$

2.4.3. Kelvin-Helmholtz

Este modelo de atomización se basa en un análisis lineal y de primer orden de la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz (KH) [142, 193], aplicado sobre un chorro líquido cilíndrico que penetra en un gas incompresible. Se plantea una ecuación de dispersión para obtener la frecuencia Ω_{KH} relacionada a la longitud de onda de mayor crecimiento en la superficie del chorro Λ_{KH} ,

$$\Lambda_{KH} = \frac{9,02 r_0 \left[\left(1 + 0,45 \sqrt{Z} \right) \left(1 + 0,4 T^{0,7} \right) \right]}{\left(1 + 0,865 We_g^{1,67} \right)^{0,6}}, \quad (2.41)$$

$$\Omega_{KH} = \frac{0,34 + 0,385 We_g^{1,5}}{(1 + Z)(1 + 1,4 T^{0,6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l r_0^3}}, \quad (2.42)$$

donde $Z = \sqrt{We_l}/Re_l$ es el número de Ohnesorge, $T = Z\sqrt{We_g}$ es el número de Taylor, We_g es el número de Weber de la fase gaseosa, We_l es el número de Weber de la fase líquida y We_l es el número de Reynolds de la fase líquida. Las ondas que van creciendo en la superficie con longitud Λ_{KH} son las causantes de la atomización y el desprendimiento de nuevas gotas. El tamaño de las nuevas gotas r_{KH} se asume proporcional a Λ_{KH} ,

$$d_{KH} = 2B_0 \Lambda_{KH}, \quad (2.43)$$

siendo B_0 una constante del modelo que se fija en $B_0 = 0,61$. De forma similar a lo planteado en la Ec. (2.33), la tasa de variación de la parcela madre se calcula como,

$$\frac{d(d_l)}{dt} = -\frac{d_0 - d_{KH}}{\tau_{KH}} \quad d_{KH} \leq d_0, \quad (2.44)$$

en donde τ_{KH} es el tiempo característico del modelo calculado a partir de la velocidad característica $\Omega_{KH}\Lambda_{KH}$ y una distancia proporcional al diámetro de la gota madre d_0 ,

$$\tau_{KH} = \frac{3,788 B_1 d_0}{2 \Omega_{KH} \Lambda_{KH}}, \quad (2.45)$$

donde la constante B_1 se utiliza para ajustar los resultados del modelo a partir de datos experimentales. Esta constante considera los efectos turbulentos del chorro líquido sobre la velocidad de aparición de las inestabilidades. Cuanto menor es el valor de B_1 mayor es la tasa de atomización efectiva. Siguiendo la Ec. (2.44) el diámetro de la parcela se actualiza como,

$$d_1 = d_0 - \frac{(d_0 - d_{KH})(t_1 - t_0)}{\tau_{KH}}. \quad (2.46)$$

El proceso de atomización se efectúa de igual forma que para el modelo de HG empleando la expresiones (2.35) y (2.36) para determinar la masa despojada y el número de parcelas hijas respectivamente. A diferencia del proceso de HG, el criterio de atomización se define cuando la masa despojada supera el 3 % de la masa de la parcela madre.

2.4.4. Rayleigh-Taylor

De acuerdo al fenómeno investigado por Taylor [169], cuando dos líquidos con diferentes densidades y velocidades interactúan, aparecen aceleraciones normales a la interfaz que generan inestabilidades. La inestabilidad aparece cuando la fase más densa se acelera en comparación con la fase más liviana. En el caso de una gota con velocidad relativa inmersa en aire, esta inestabilidad se aprecia en la parte posterior de

la gota. En el caso particular de una gota líquida sumergida en una corriente de gas, las fuerzas de arrastre pueden producir una aceleración normal a la interfase dando lugar a la inestabilidad de Rayleigh-Taylor. Despreciando la viscosidad del líquido, la frecuencia Ω_{RT} de la longitud de onda de mayor velocidad de crecimiento (Λ_{RT}) se define como,

$$\Omega_{RT} = \sqrt{\frac{2}{3\sqrt{3}\sigma} \left[\frac{a(\rho_l - \rho_g)}{\rho_l + \rho_g} \right]^{3/2}}, \quad (2.47)$$

$$\Lambda_{RT} = C_{RT} 2\pi \sqrt{\frac{3\sigma}{a(\rho_l - \rho_g)}}, \quad (2.48)$$

en donde a es la aceleración debido a la fuerza de arrastre,

$$a = \frac{3}{8} C_d \frac{\rho_g \|u_r\|^2}{\rho_l r}, \quad (2.49)$$

siendo C_d el coeficiente de arrastre y u_r la velocidad relativa entre la gota y el aire. La constante C_{RT} regula el tamaño de la longitud de onda atendiendo a las incertidumbres sobre las características del flujo líquido saliente del inyector. A esta constante se la define con un valor $C_{RT} = 0,1$. El tiempo característico de desarrollo de la onda es proporcional a la inversa de la frecuencia Ω_{RT} ,

$$\tau_{RT} = \frac{C_\tau}{\Omega_{RT}}, \quad (2.50)$$

siendo $C_\tau = 1$ una constante de ajuste del modelo. Siempre que el diámetro de la gota sea mayor que la longitud de onda Λ_{RT} se asume que las ondas comienzan a crecer en su superficie. El tiempo de desarrollo de estas ondas t_{RT} se computa según:

$$t_{RT1} = t_{RT0} + (t_1 - t_0) \quad (2.51)$$

Cuando el tiempo acumulado de crecimiento de la onda es mayor al tiempo característico $t_{RT1} \geq \tau_{RT}$ se asume que la gota se desintegra totalmente en nuevas gotas hijas con diámetro $d_h = \Lambda_{RT}$. A diferencia de los modelos de atomización de HG y KH, en RT no se genera una nueva parcela ya que la sucesiva atomización resultante de este modelo producirá una cantidad excesiva de parcelas incrementando el costo computacional. A raíz de esto, el proceso de atomización se traduce en un aumento del número de partículas que representa la parcela en cuestión según,

$$N_{\hat{p}1} = N_{\hat{p}0} \left(\frac{d_0}{d_1} \right)^3 \quad (2.52)$$

y además se vuelve a cero el tiempo acumulado de crecimiento de onda $t_{RT_1} = 0$.

2.5. Sumario de la problemática de inyección

La principal finalidad de la inyección directa es distribuir el combustible de forma precisa en el cilindro, favoreciendo su rápido transporte y evaporación. En este proceso, la atomización es clave para lograr una gran superficie de interfase, acelerar la transferencia de energía al combustible y producir su evaporación. La fragmentación del chorro inyectado se produce por el crecimiento de inestabilidades en la interfase que deforman el chorro hasta producir el desprendimiento de gotas y ligamentos. Este proceso es un fenómeno puramente inercial que se ve fuertemente afectado por la turbulencia y por otras características del flujo. La cavitación y los factores geométricos del inyector también influyen en la fragmentación deformando las ondas en la interfase.

Por otra parte, la representación de la inyección en la simulación de motores utiliza usualmente modelos algebraicos del tipo DPM. La atomización en estas formulaciones está caracterizada por la variación del diámetro de las parcelas y la producción de parcelas hijas a raíz del desgranamiento de la parcela original. En los modelos descriptos (HG, KH, RT), estos procesos dependen de coeficientes constantes que se ajustan empíricamente; esto reduce la capacidad predictiva de los modelos e implica la necesidad de un proceso de validación más exhaustivo.

En este contexto, se propone en esta tesis una primera aproximación a la simulación de problemas de inyección haciendo foco en los procesos de deformación de la interfase, cómo los mismos afectan la tasa de atomización y las propiedades de las gotas desprendidas, en particular su diámetro y velocidad. Estos fenómenos pueden representarse con razonablemente precisión mediante una aproximación de flujo incompresible, que reduce notablemente la complejidad de la simulación.

El objetivo de estas simulaciones es lograr una caracterización cuantitativa de la fragmentación, más detallada que la obtenida por medios experimentales. Se espera que los resultados, a futuro, permitan proponer mejores ajustes para los coeficientes de cada modelo DPM de atomización. Otra alternativa de mejora sería reformular los modelos para lograr una descripción más general de la atomización secundaria. Esto a su vez dotaría a los modelos Lagrangianos de mayor confiabilidad, ya que el tamaño de gota afecta a todos los modelos de transferencia (principalmente arrastre y evaporación).

A fin de acotar el problema, este primer estudio considera condiciones de inyección simplificadas. En futuros análisis se pretende considerar las características del flujo dentro de la boquilla para evaluar el desempeño de los sistemas de inyección modernos.

En dicha instancia, el modelo a emplear deberá utilizar una formulación compresible y considerar los efectos de cavitación en el inyector.

Capítulo 3

Mecánica de Flujos Multifásicos

La Dinámica de Fluidos puede describirse en términos de balances integrales de masa, momento y energía derivados de la Mecánica de Medios Continuos (MMC). A partir de estas expresiones, si se cumplen las hipótesis del continuo, puede obtenerse un sistema de Ecuaciones en Derivadas Parciales (EDP) que describe el comportamiento local del flujo. Para dar cierre al sistema de ecuaciones, deben definirse relaciones constitutivas y modelos reológicos de las sustancias. Finalmente, al resolver ese sistema se obtienen los campos de flujo de interés.

En el caso de flujos multifásicos, la discontinuidad de las propiedades a través de las interfases impide el procedimiento anterior. Sin embargo, todos los balances son válidos dentro de cada región continua. En este contexto, pueden definirse condiciones de salto que establecen relaciones entre los campos a cada lado de la discontinuidad. Aplicando dicha restricción, puede recuperarse la forma diferencial de las ecuaciones integrales.

Por otra parte, el desarrollo de la turbulencia a partir de la no linealidad en el balance de momento lineal conduce a una evolución caótica del flujo. A fin de analizar más en detalle la complejidad de este fenómeno, la teoría de turbulencia -desarrollada durante el siglo XX a partir de los trabajos de Reynolds, Prandlt, Taylor, Richardson y Kolmogorov entre otros- permite definir diferentes escalas en función de la transferencia de energía cinética y el comportamiento estadístico del flujo. Este enfoque, descrito brevemente al final del capítulo, se encuentra fuertemente relacionado a los modelos de turbulencia usualmente empleados en los métodos numéricos.

EN síntesis, este capítulo describe un modelo de flujo general, el conjunto de ecuaciones particulares para flujos bi-fásicos incompresibles - usualmente empleado en la simulación de atomización - y la aplicación de técnicas de promediado para el modelado de flujos turbulentos.

3.1. Formulación general de un continuo multiespecie

A nivel macroscópico, los principios de conservación físicos pueden plantearse en términos de balances integrales (en particular de masa, momento y energía) en un volumen de control dado. Estas expresiones de carácter universal son válidas para cualquier volumen arbitrario que cumpla la hipótesis del continuo¹. Asimismo, considerando las condiciones de salto en las interfases, como la ilustrada en la Figura 3.1, puede definirse una expresión general de los balances para la descripción de un flujo multifásico. Aplicando la Regla de Integración de Leibniz y el Teorema de Gauss -Ecuaciones (3.3) y (3.4) respectivamente- es posible obtener la formulación diferencial del modelo, que describa el comportamiento local del flujo para cada punto del espacio.

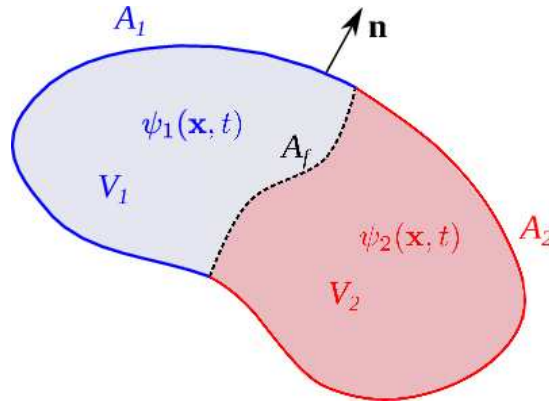


Figura 3.1: Volumen de control con 2 fases separadas por la interfase A_f [180]

3.1.1. Ecuaciones diferenciales de balance local

La formulación general de la Mecánica del Continuo Multiespecie Multifásica a continuación está basada principalmente en los trabajos de Ishii [67], Zanotti [199], Corzo [27] y Venier [180].

Dado el volumen de control de la Figura 3.1, un balance general de una propiedad intensiva ψ sobre la porción de continuo de la fase i puede expresarse como:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_i(t)} \rho_i \psi_i dV + \int_{A_i(t)+A_f(t)} \rho_i \psi_i (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}) dA = \int_{A_i(t)+A_f(t)} -\mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n} dA + \int_{V_i(t)} \rho_i \Phi_i dV \quad (3.1)$$

¹Se considera que un sistema es continuo si todas sus propiedades pueden representarse como una función suave en el espacio

donde i es el índice que representa la fase en cuestión, V_i es el volumen de dicha fase, A_i es el área de la frontera exterior de la fase, A_f es el área de la interfase, ψ es la variable transportada, \mathbf{u} es la velocidad de transporte, \mathbf{n} es el vector unitario normal a la superficie A orientado positivamente, \mathbb{J} es el flujo difusivo y Φ es un término fuente. Para lograr un balance general del sistema completo se suman ecuaciones de ambas fases:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 \frac{d}{dt} \int_{V_i(t)} \rho_i \psi_i dV + \sum_{i=1}^2 \int_{A_i(t)} \rho_i \psi_i (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{n}) dA = \\ - \sum_{i=1}^2 \int_{A_i(t)} \mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n} dA + \sum_{i=1}^2 \int_{V_i(t)} \rho_i \Phi_i dV + \int_{A_f(t)} \phi_f dA \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde ϕ_f condensa todos los integrandos sobre A_f de la Ec. (3.2) y representa todos los intercambios dados a través de la interfase.

A fin de concentrar los términos de frontera en una única integral de volumen se utilizan las siguientes identidades matemáticas:

- Regla de integración de Leibniz:

$$\frac{d}{dt} \int_{V_i(t)} f dV = \int_{V_i(t)} \frac{\partial f}{\partial t} dV + \int_{A_i(t)+A_f(t)} f \mathbf{v}_f \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.3)$$

- Teorema de Gauss:

$$\int_{V_i(t)} \nabla \cdot \mathbb{F} dV = \int_{A_i(t)} \mathbb{F} \cdot \mathbf{n} dA \quad (3.4)$$

En el caso particular en que la frontera del volumen de control no se desplaza ni deforma ($\mathbf{v}_f|_{A_i(t)} = 0$), en la Ecuación (3.3) solo persiste la integral sobre A_f . Entonces, aplicando las Ecuaciones (3.3) y (3.4) sobre los términos de la Ecuación (3.2) y reagrupando, se obtiene:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^2 \int_{V_i(t)} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\rho_i \psi_i) + \nabla \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot \mathbb{J}_i - \rho_i \Phi_i \right] dV \\ - \int_{A_f} \left\{ \sum_{i=1}^2 [\rho_i \psi_i (\mathbf{u}_i - \mathbf{v}_f) \cdot \mathbf{n} + \mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n}] + \phi_f \right\} dA = 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

A su vez, el flujo de masa por unidad de superficie a través de la interfase \dot{m}_{if} se define como:

$$\dot{m}_{if} = \rho_i(\mathbf{u}_i - \mathbf{v}_f) \cdot \mathbf{n} \quad (3.6)$$

La Ecuación homogénea (3.5) se cumple, bajo las hipótesis planteadas, para todo dominio $V_i(t)$ indeformable e inmóvil, para toda geometría de interfase $A_f(t)$. Por lo tanto, los integrandos deben ser idénticamente nulos. De esta manera, se obtienen las ecuaciones siguientes:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \psi_i) + \nabla \cdot (\rho_i \psi_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot \mathbb{J}_i - \rho_i \Phi_i = 0 \quad (3.7)$$

$$\sum_{i=1}^2 \dot{m}_i \psi_i + \mathbb{J}_i \cdot \mathbf{n} = -\phi_f \quad (3.8)$$

La Ecuación (3.7) corresponde al balance local de la propiedad ψ_i , mientras que la Ecuación (3.8) representa la condición de salto local en la interfase. En particular, los balances de masa y momento lineal descritos a continuación con mayor detalle.

Conservación de masa El principio clásico de conservación implica que la masa no se crea ni destruye. Por lo tanto, no existen fuentes ni sumideros. Además, considerando que no hay difusión entre fases.

$$m|_{V_i(t)} = \int_{V_i(t)} \rho_i \psi_i dV \implies \psi_i = 1 \quad \mathbb{J}_i = 0 \quad \Phi_i = 0 \quad \phi_f = 0$$

Reemplazando en la Ecuación 3.7, se obtiene el balance de masa para cada fase. La condición de salto derivada a partir de la Ecuación 3.8 implica que la interfase no retiene masa.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i) + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{u}_i) = 0 \quad (3.9)$$

$$\sum_{i=1}^2 \dot{m}_i = 0 \quad (3.10)$$

Conservación de momento lineal La variación de momento lineal en un volumen de control se encuentra afectada por los efectos de fuerzas de contacto, representadas en el tensor de esfuerzos \mathbb{T}_i , y acción a distancia, representadas por el vector \mathbf{b}_i . Asimismo, se consideran las fuerzas de tensión superficial dadas por el término

$\sigma \kappa \mathbf{n}_f$. Una descripción detallada del tratamiento matemático de las fuerzas de tensión superficial puede encontrarse en el capítulo 2 de [174].

$$\mathbf{p}|_{V_i(t)} = \int_{V_i(t)} \rho_i \mathbf{u}_i dV \implies \psi_i = \mathbf{u}_i \quad \mathbb{J}_i = -\mathbb{T}_i \quad \Phi_i = \mathbf{b}_i \quad \phi_f = \sigma \kappa \mathbf{n}$$

De esta manera, se obtiene la ecuación de momento para cada fase y la condición de salto que marca el balance de las fuerzas en la interfase:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_i \mathbf{u}_i) + \nabla \cdot (\rho_i \mathbf{u}_i \mathbf{u}_i) = \nabla \cdot \mathbb{T}_i + \rho_i \mathbf{b}_i \quad (3.11)$$

$$\sum_{i=1}^2 \dot{m}_i \mathbf{u}_i - (\mathbb{T}_i \cdot \mathbf{n} + \sigma \kappa \mathbf{n}) = 0 \quad (3.12)$$

De forma análoga, se pueden plantear balances de energía, entropía y momento angular. Puede también observarse que las ecuaciones obtenidas son aplicables a flujos monofásicos.

3.1.2. Función indicadora de fase e identidades entre promedios

Una forma de describir la distribución de las fases en el espacio es emplear funciones de Heaviside $c_i(\mathbf{x}, t, \mu)$ como:

$$c_i(\mathbf{x}, t, \mu) = \begin{cases} 1 & \text{si } (\mathbf{x}, t, \mu) \in i \\ 0 & \text{en caso contrario} \end{cases}$$

El valor medio de esta variable integrada en una región dada corresponde a la fracción del volumen ocupada por la fase de interés,

$$\tilde{c}_i = \frac{1}{V} \int_V c_i dV. \quad (3.13)$$

Esta variable se denomina *fracción de volumen* y cumple con la identidad:

$$\sum_{i=1}^n \tilde{c}_i = 1. \quad (3.14)$$

Mediante el uso de funciones de prueba y el teorema del transporte de Reynolds, Drew y Passman [34] han demostrado el siguiente balance:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla c_i = 0 \quad (3.15)$$

Esta ecuación es conocida como la *Ecuación Topológica* y simplemente indica que el transporte de las fases es puramente advectivo.

3.2. Modelos de flujo y sistemas de EDP cerrados

A partir de las relaciones desarrolladas a lo largo del capítulo, se observa que el sistema de Ecuaciones en Derivadas Parciales que describe la dinámica de un continuo multi-componente es el siguiente:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}) &= r_k \\ \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= \nabla \cdot (\mathbb{T}) - \rho \mathbf{f} \\ \frac{\partial \rho e}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} e) &= \mathbb{T} : \nabla(\mathbf{u}) - \nabla \cdot (\mathbf{q}) + \rho r_h \end{aligned} \quad (3.16)$$

el término fuente r_k corresponde a la variación de concentración debido a reacciones químicas. e es la energía interna total del flujo, \mathbf{q} y ρr_h representan la transferencia de energía por conducción y radiación respectivamente.

Este sistema no es cerrado: para llegar a un conjunto de ecuaciones que puedan resolverse es necesario considerar modelos reológicos para la sustancia (que definan \mathbb{T} en términos de las variables y las propiedades del fluido) y relaciones constitutivas que defina el comportamiento de los fenómenos de transferencia (e. g. ley de Fourier para definir q por conducción).

3.2.1. Flujo compresible

Para el caso de flujo compresible de una sustancia pura, sólo las últimas tres ecuaciones son necesarias. Si además, se considerando un gas ideal Newtoniano con conductividad constante y totalmente transparente (radiación nula), el modelo se cierra de la siguiente manera:

- Ecuación de estado: $p = \rho RT$
- Relación constitutiva de esfuerzos: $\mathbb{T} = -p\mathbb{I} + \tau_\mu$
- Modelo viscoso Newtoniano: $\tau_\mu = \mu \left[\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right] + \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbb{I}$
- Relación constitutiva de conducción: $\mathbf{q} = -k(\nabla T)$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) &= 0 \\
\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_\mu) - \rho \mathbf{f} \\
\rho \frac{\partial e}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla(e) &= -\nabla \cdot (p \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_\mu \cdot \mathbf{u}) + \nabla \cdot [k \nabla(T)]
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Este sistema de ecuaciones es la base para los modelos que representan la fase gaseosa en simulaciones de ciclos completos de MCI. Es importante notar que este sistema de EDP tiene tres variables independientes (p, ρ, e) fuertemente acopladas, no sólo por las EDP sino también por la Ecuación de estado. Más aún, la complejidad del modelo reológico aumenta si se considera la mezcla del combustible evaporado. En última instancia, este sistema permite aplicar modelos simplificados de combustión mediante un término fuente en la ecuación de energía.

De esta manera, el sistema dado en (3.17) puede extenderse hasta capturar todos los fenómenos relevantes en el flujo dentro de una cámara de combustión.

3.2.2. Flujo bifásico incompresible con tensión superficial

Si se considera un flujo incompresibilidad, la conservación de masa se reduce a una condición de velocidad solenoidal ($\nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0$). Al haber sólo dos fases, una única ecuación de transporte para la fracción de volumen determina totalmente la distribución de ambas fases. A su vez, si pueden despreciarse las variaciones de propiedades debido a cambios temperatura, usualmente se adopta la hipótesis de flujo isotérmico. En ese caso, la energía pierde relevancia y la resolución de su balance no es necesaria.

En este contexto, se obtiene el sistema de ecuaciones que constituye el modelo de flujo bifásico Newtoniano incompresible e isotérmico con fuerza de tensión superficial (sin fuerzas de cuerpo). Dicho sistema es el siguiente:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \mathbf{u}) &= 0 \\
\nabla \cdot (\mathbf{u}) &= 0 \\
\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= -\nabla p + \nabla \cdot [2\mu \mathbf{D}] + \sigma \kappa \delta_s \mathbf{n}_s
\end{aligned} \tag{3.18}$$

donde el esfuerzo de corte viscoso se considera proporcional al tensor tasa de deformación \mathbf{D} , que sigue la definición $\frac{1}{2} [\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T]$. La condición de salto de momento en la interfase dada por la fuerza de tensión superficial en la Ecuación (3.12) es modelada de acuerdo a Brackbill [16] como el producto de la constante σ , la curvatura de la interfase κ y el vector normal unitario \mathbf{n}_s . La delta de Dirac δ_s indica que la fuerza actúa sólo en la superficie de la interfase.

En este contexto, la función de Heaviside c_1 suele verse representada con el símbolo c , que indica la distribución de la fase principal. Es decir, en base a la Ecuación 3.15, la fracción de cada fase será $\tilde{c} = \tilde{c}_1$ es $\tilde{c}_2 = 1 - \tilde{c}$. Las propiedades del flujo se computan en función de la fracción de volumen, con medias aritméticas o armónicas, además de ser usualmente empleada para calcular las propiedades medias de mezcla [67, 174], mediante media aritmética (ρ) o armónica (μ),

$$\rho = \rho_1 \tilde{c} + \rho_2 (1 - \tilde{c}) \quad \mu = \left(\frac{\tilde{c}}{\mu_1} + \frac{1 - \tilde{c}}{\mu_2} \right)^{-1}. \quad (3.19)$$

Si bien el modelo compresible también puede extenderse para considerar flujos multifásicos, la gran mayoría de los estudios de atomización se basan en modelos incompresible e isotérmicos. Esto se debe a que, si las velocidades de flujo moderadas ($Ma < 0,3$) y las variaciones de temperatura despreciables, esta aproximación no introduce errores significativos y permite prescindir de la ecuación de energía, simplificando el problema considerablemente.

3.3. Descripción de la turbulencia

La gran mayoría de los flujos, tanto en la naturaleza como en aplicaciones de ingeniería, son turbulentos. A pesar de su ubicuidad, no es sencillo dar una definición precisa de qué es la turbulencia. Sin embargo, es posible describir sus principales propiedades:

- Impredecibilidad: la fuerte variación del campo de velocidad, tanto en el tiempo como en el espacio, dificulta el uso de métodos determinísticos para su descripción. Por ende, es necesario aplicar análisis estadísticos.
- Tridimensionalidad: Los flujos turbulentos se desarrollan siempre de manera tridimensional, rompiendo simetrías y generando un alto grado de mezcla.
- Difusividad: la variabilidad en el flujo se propaga rápidamente. Esto produce un comportamiento difusivo de gran importancia para aplicaciones de ingeniería, en particular aquellas que involucren un proceso de mezcla.
- Escalas de flujo: la turbulencia presenta un amplio rango de escalas características en tiempo y espacio. Es decir, las propiedades presentan variaciones que se descomponen en funciones con longitudes de onda tanto pequeñas como grandes.

Así, Sagaut define a la turbulencia como “un problema multiescala altamente no lineal con fuerte acoplamiento entre escalas” [150]. Pope, por otra parte, lo define como la “existencia de variaciones significativas e irregulares, tanto en espacio como en tiempo, de las variables de flujo”. [131].

Algunos autores relacionan el comportamiento caótico de los flujos de alto número de Reynolds con la interacción entre el término no lineal en la ecuación de Navier-Stokes con la derivada temporal [170]. De esta manera, puede comprenderse cómo un modelo determinístico puede conducir a soluciones que presenten variaciones que parecen ser aleatorias.

Dada la dificultad de emplear modelos determinísticos para sistemas caóticos, el análisis de flujos turbulentos se ha basado principalmente en herramientas estadísticas. A su vez, el acoplamiento entre escalas ha sido estudiado mediante análisis sobre la transferencia de energía mecánica entre escalas, relacionando las características de las grandes estructuras de flujo con las variaciones locales [76, 81].

3.3.1. Transporte de energía cinética

El contexto más básico en el que se analiza la turbulencia es en el caso de un flujo incompresible, Newtoniano e isotérmico, descrito por las ecuaciones de conservación de masa y momento.

$$\begin{aligned}\nabla \cdot (\mathbf{u}) &= 0 \\ \frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) &= -\nabla p + \nabla \cdot [2\mu \mathbf{D}]\end{aligned}\tag{3.20}$$

Luego, puede formularse un balance de energía cinética en los términos siguientes

$$\frac{\partial (u^2/2)}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\frac{u^2}{2} \mathbf{u} \right) - \nabla \cdot \left(\frac{p}{\rho} \mathbf{u} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{1}{\rho} \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\tau}_\mu \right) - 2\nu (\mathbf{D} : \mathbf{D})\tag{3.21}$$

donde los dos primeros términos del lado derecho representan el transporte advectivo y el trabajo de las fuerzas de presión respectivamente. El tercer término es el trabajo de las fuerzas viscosas, donde el tensor de esfuerzos viscosos depende de la deformación de flujo $\boldsymbol{\tau}_\mu = 2\mu \mathbf{D}$. El último término es la función disipación, siempre positiva debido a la simetría del \mathbf{D} . A su vez, para flujos incompresibles, la disipación de energía cinética puede notarse en términos de la vorticidad ($\boldsymbol{\omega} = \nabla \wedge \mathbf{u}$)

$$\varepsilon = 2\nu \mathbf{D} : \mathbf{D} = \nu \boldsymbol{\omega}^2\tag{3.22}$$

la relación anterior suele también escribirse en términos de enstrofía ($\Omega = \omega^2/2$). Así, el balance de energía cinética permite observar que las mayores tasas de disipación se encuentran en las regiones de flujo donde la magnitud de los gradientes de velocidad es mayor. Dicho de otra manera, las regiones con una variación marcada del flujo provocarán una disipación de energía más elevada.

En el contexto de flujo compresible, la Ecuación 3.21 suele expresarse en función del momento, $\rho \mathbf{u}$, donde surgen además términos relacionados a los trabajos de compresión. Para el caso de flujos multifásicos es además necesario considerar el trabajo de las fuerzas interfaciales.

Si bien estas alternativas pueden dar una descripción completa de los problemas más complejos, para los casos bifásicos incompresibles usualmente se analizan los dominios de fases puras donde es válida la Ecuación 3.21. Es decir, la teoría clásica de turbulencia es puede emplearse en regiones relativamente alejadas de la interfase.

3.3.2. Descomposición del flujo

Debido al carácter caótico de la turbulencia, su estudio ha estado fuertemente apoyado en análisis estadísticos. En este contexto, el valor medio de las propiedades de flujo es una magnitud de gran importancia. A continuación se definen diversas técnicas de promediado y los correspondientes valores medios de una propiedad ψ , dependiente del vector posición \mathbf{x} , del tiempo t y del *número de evento* μ ,

Media espacial:

$$\overline{\psi}^V = \frac{1}{V} \int_V \psi(\mathbf{x}, t_0, \mu_0) dV \quad (3.23)$$

Media temporal:

$$\overline{\psi}^T = \frac{1}{\Delta T} \int_t^{t+\Delta T} \psi(\mathbf{x}_0, t, \mu_0) dt \quad (3.24)$$

Media de ensamble:

$$\overline{\psi}^E = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \psi(\mathbf{x}_0, t_0, \mu_n) \quad (3.25)$$

La hipótesis de *ergodicidad* enuncia que los tres promedios son equivalentes. Esta condición se cumple cuando el flujo es estadísticamente estacionario y homogéneo.

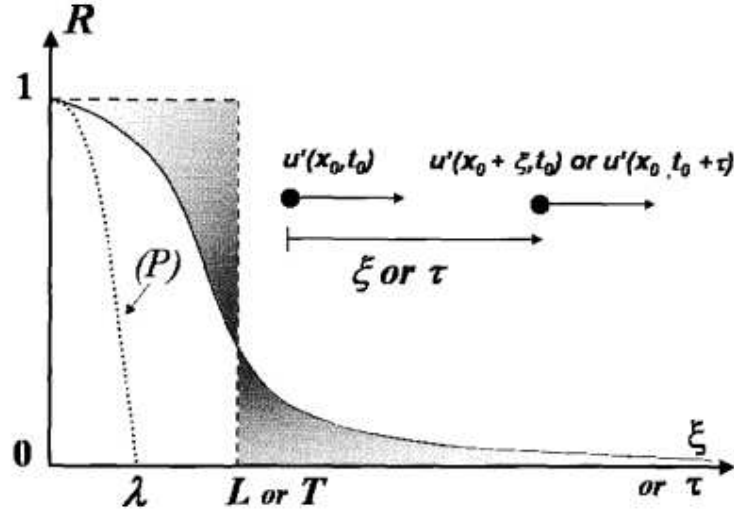


Figura 3.2: Correlación para la perturbación de velocidad y escalas integrales [150].

De esta manera, es posible proponer una descomposición del campo velocidad $\mathbf{u}(x, t)$ en valor medio y perturbación,

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} + \mathbf{u}', \quad (3.26)$$

donde el campo perturbación \mathbf{u}' representa las variaciones locales de \mathbf{u} en la región de promediado, por ejemplo en el volumen V para la media espacial. Así, puede definirse la correlación espacio-temporal (en un contexto unidimensional simplificado), puede escribirse en los términos siguientes:

$$R(x, x', t, t') = \frac{\overline{u'(x, t)u'(x', t')}}{\overline{u'(x, t)u'(x, t)}} \quad (3.27)$$

$$R(\zeta, t_0) = \frac{\overline{u'(x, t_0)u'(x + \zeta, t_0)}}{\overline{u'(x, t_0)u'(x, t_0)}} \quad R(x_0, \tau) = \frac{\overline{u'(x_0, t)u'(x_0, t + \tau)}}{\overline{u'(x_0, t)u'(x_0, t)}}$$

donde las variables ζ y τ son respectivamente intervalos espaciales o temporales en los que se analiza la correlación del campo perturbación. La función auto-correlación de un flujo turbulento desarrollado sigue la forma que se muestra en la Figura 3.2. En dicha imagen se representan también las macro-escalas espacial y temporal de Taylor:

$$L = \int_0^\infty R(x, \tau) d\tau \quad T = \int_0^\infty R(\zeta, t) d\zeta \quad (3.28)$$

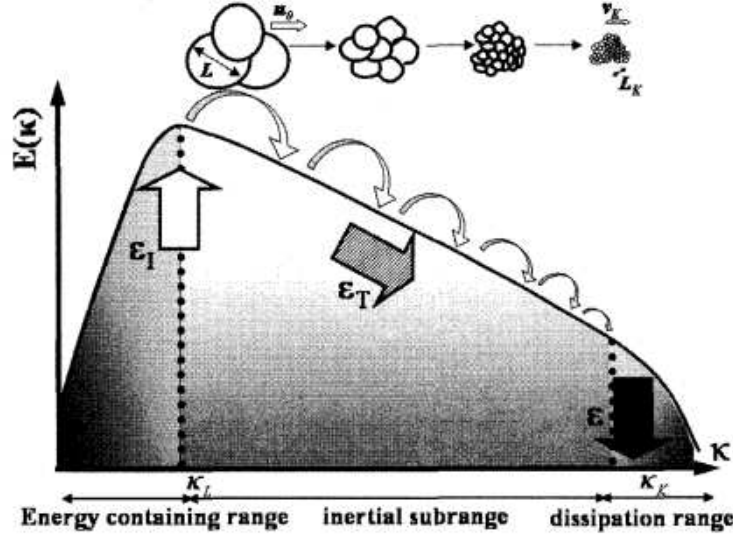


Figura 3.3: Cascada de energía con representación esquemática de decaimiento de vórtices [150].

ambas magnitudes, llamadas también escalas integrales, dan cuenta de la máxima longitud a la cual se mantiene una correlación superior a la media, es decir, la escala característica del vórtice mayor. Por otra parte, la micro-escala de Taylor λ , es una longitud característica relacionada al gradiente de velocidad:

$$\frac{\partial^2 R(\zeta, t)}{\partial \zeta^2} = \frac{2}{\lambda^2(t)}, \quad (3.29)$$

que es una escala relacionada al gradiente de velocidad en los vórtices disipativos [150]. En el contexto de turbulencia isotrópica, relaciona la función de disipación con el valor medio de las perturbaciones:

$$\varepsilon = 2\nu \frac{\overline{u'^2}}{\lambda^2}. \quad (3.30)$$

A partir de la Ecuación (3.30), puede establecerse un vínculo entre las escalas del flujo y por su contenido energético. Por ejemplo, considerando la energía cinética de las perturbaciones, $k = 0,5 \overline{u'^2}$, puede trazarse el espectro (Figura 3.3) que muestra la distribución de energía cinética $E(k)$ en el rango de escalas de flujo dado por sus números de onda $k = L^{-1}$. Si el gráfico se divide por zonas, la escala de vórtices que contienen energía está determinada por la longitud

$$L = \frac{\int_0^\infty \frac{E(k)}{k} dk}{\int_0^\infty E(k) dk} \quad (3.31)$$

Dado que esta escala integral está caracterizada por contener la energía cinética del flujo, su escala de velocidad puede definirse como $u_0 = \sqrt{2k}$.

Por otra parte, los vórtices más pequeños, donde se genera la disipación de energía, son aquellos en los que la advección y los términos viscosos se igualan. Así, el número Reynolds de esas escalas, usualmente conocidas como escalas de Kolmogorov, será igual a la unidad. Asimismo, la energía cinética en dicha escalas será totalmente disipada. De esta manera,

$$\text{Re} = \frac{\eta v_K}{\nu} = 1 \quad \varepsilon = \frac{\nu}{\tau_K^2} \quad (3.32)$$

donde $\eta = L_K$ es la escala de longitud de Kolmogorov, la dimensión característica de los vórtices disipativos. A partir de estas dos definiciones, pueden determinarse las escalas más pequeñas del flujo en función de la viscosidad del fluido y de la disipación de energía.

$$\tau_K = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \quad \eta = \frac{\nu^{3/4}}{\varepsilon^{1/4}} \quad \nu_K = (\nu \varepsilon)^{1/4} \quad (3.33)$$

Finalmente, puede establecerse una relación entre la escala integral y la de Kolmogorov en función del Reynolds general del problema,

$$\text{Re}_L = \frac{u_0 L}{\nu} \quad \varepsilon \approx \frac{u_0^3}{L} \rightarrow \frac{\eta}{L} = \text{Re}_L^{-3/4}. \quad (3.34)$$

Estas relaciones denotan el fuerte carácter multiescala de la turbulencia: la cantidad de vórtices disipativos en un flujo turbulento es proporcional a $(L/\eta)^3 = \text{Re}_L^{9/4}$.

3.4. Sumario y aplicación a problemas de atomización

En términos generales, las ecuaciones que describen la evolución de un flujo multifásico de manera local son balances diferenciales de masa, momento y energía. El sistema de ecuaciones se cierra mediante relaciones constitutivas y reológicas, dadas por las hipótesis aplicadas al problema. El resultado de este sistema acoplado serán los campos de flujo (\mathbf{u} , p , T).

Otro elemento que agrega complejidad al modelo es la no linealidad en el balance de momento. A medida que aumenta el número de Reynolds la evolución del flujo se torna turbulenta, elevando la variabilidad de los campos y generando múltiples escalas de flujo.

La inyección de combustible en motores, en particular, es un problema que involucra todas las complejidades analizadas en este capítulo: es un flujo multifásico,

multiespecie y turbulento que involucra transferencia de masa y energía. Sin embargo, es posible analizar dos sub-procesos de la inyección con modelos simplificados:

Por un lado, la atomización del combustible líquido depende mayormente de efectos inerciales, que pueden representarse correctamente con un modelo bi-fásico incompresible e isotérmico. Este problema requiere una representación de fenómenos de superficie mediante la función c que determina la distribución de fases, pero reduce la complejidad del modelo despreciando los fenómenos energéticos. En este marco de estudio pueden determinarse la tasa de atomización del chorro y las características geométricas del *spray* (Diámetro Medio de Sauter, penetración, ángulo de cono) en las regiones de atomización primaria.

En contraste, la formación de la mezcla aire-combustible es esencialmente un fenómeno de transferencia de masa y energía. Por lo tanto, será necesario resolver los tres balances dados en las Ecuaciones 3.17. El proceso de evaporación ocurre en las regiones del aerosol donde las estructuras líquidas se encuentran dispersas en el gas en muy pequeñas proporciones, por lo que pueden emplearse modelos monofásicos o de mezcla [67], donde se consideran las propiedades promediadas del flujo. Este tipo de modelos permite hacer foco en la distribución de reactivos sin representar la geometría de la interfase.

En ambos casos la turbulencia juega un rol importante. Considerando la atomización del chorro, la variación de los campos de velocidad interactúa con las inestabilidades hidrodinámicas afectando significativamente su crecimiento. En el problema de formación de carga en el motor, por otra parte, la variación turbulenta del flujo acelera los procesos de mezcla favoreciendo el transporte del combustible evaporado.

Capítulo 4

Métodos Numéricos aplicados a Flujos Multifásicos Turbulentos

La Mecánica de Fluidos Computacional (CFD) aplicada a la simulación de flujos multifásicos turbulentos es un amplio campo de investigación. A fines prácticos, el desarrollo de una herramienta computacional concreta requiere definir un conjunto de técnicas que definen el algoritmo de resolución numérica del problema.

En primera instancia, es necesario emplear métodos que aproximen el modelo continuo mediante sistemas algebraicos, discretizando el dominio y los operadores diferenciales. En este sentido, el Método de Volúmenes Finitos (FVM) es una técnica ampliamente difundida en CFD, implementada en OpenFOAM® [1, 74, 102] (mallas no estructuradas) y en Basilisk [132, 133, 135] (mallas cartesianas).

Por otra parte, las Ecuaciones de Navier-Stokes discretas pueden resolverse con diferentes enfoques. Una práctica muy difundida es emplear algoritmos segregados, siendo particularmente populares aquellos basados en el método de la proyección. Asimismo, dentro de esta familia existen variantes (*e. g.* FSM, PISO, SIMPLE) que presentan diversas combinaciones de costo y robustez.

El modelado de la interfase también puede abordarse de diversas maneras. Para análisis mediante Simulación Numérica Directa (DNS) usualmente se emplean técnicas de *interface-capturing*, entre las que se destaca el método de Volumen de Fluido (VOF). Las implementaciones de VOF geométricas son particularmente aptas para problemas dominados por la tensión superficial.

El modelado de la turbulencia es una herramienta fundamental para acotar el costo computacional en problemas con altos números de Reynolds. Una primera clasificación permite diferenciar dos metodologías: RANS y LES. Los modelos RANS, ampliamente utilizados en ingeniería, resuelven las Ecuaciones de Navier-Stokes para el flujo medio temporal. Los métodos LES, en cambio, resuelven las ecuaciones para

promedios espaciales de los campos de flujo y aplican correcciones que representen los efectos de las escalas no representadas. Esta técnica tiene una fuerte relación con la teoría de turbulencia desarrollada en la Sección 3.3.

Otra herramienta particularmente útil para capturar fenómenos locales es el Refinamiento de Malla Adaptativo (AMR). Esta técnica permite aplicar mayor resolución de malla en las regiones de interés reduciendo el error numérico en dichas zonas.

En este contexto, el presente capítulo describe las bases generales de FVM, para finalmente dar los lineamientos del *solver* VOF-PLIC, basado en el FSM, implementado en Basilisk. Asimismo, se dan los lineamientos principales del AMR basado en mallas *tree* y se propone una estrategia de refinamiento basado en la regulación del filtro LES, un modelo de turbulencia adaptativo.

4.1. Métodos de resolución numérica de Ecuaciones en Derivadas Parciales

Los métodos numéricos orientados a resolver Ecuaciones en Derivadas Parciales se basan en definir aproximaciones discretas de las variables continuas mediante una transformación dada y plantear, en función de la mismas, un sistema algebraico de ecuaciones equivalente a resolver empleando operaciones aritméticas [59, 183, 44]. Existen diversos métodos para definir el mapeo continuo-discreto, usualmente llamado *discretización del dominio*, como puede observarse en la Figura 4.1. En general, la primera instancia consiste en dividir el dominio de interés en subdominios, formando una malla o grilla. Así, el campo solución será representado en la malla con un único valor en cada celda, elemento o nodo. Para hallar este conjunto solución, las EDP en cuestión son reformuladas aproximando los operadores diferenciales por expresiones algebraicas entre los valores puntuales de la grilla, proceso conocido como *discretización de las ecuaciones*. El resultado será un sistema algebraico equivalente cuya solución será la versión discreta del campo.

Los tres métodos más difundidos en Mecánica de Fluidos Computacional (*Computational Fluid Dynamics*, CFD) son los Métodos de Diferencias, Elementos o Volúmenes Finitos (FDM, FEM y FVM en inglés respectivamente).

En el FDM, la grilla consiste en una serie de puntos o nodos con una ubicación predefinida en el dominio. En la EDP, cada derivada se reemplaza por aproximaciones, basadas en desarrollos por series (por ejemplo de Taylor), que se expresan en función de los valores en los nodos. Esto facilita la creación de métodos de alto orden, pero dificulta su aplicación en mallas que no estén alineadas con el sistema de referencia [59, 183].

FEM y FVM, en cambio, son formas del método de residuos ponderados que se basa en balances integrales derivados de las EDPs. FEM es la formulación más general, permitiendo el uso de diversas funciones de forma y peso para el proceso de integración. Esta propiedad hace que FEM sea más versátil, pero también lo hace más complejo y costoso. A nivel numérico, la integral en cada elemento se plantea en términos de los valores en los nodos por técnicas de cuadratura y funciones de forma [33, 97].

Finalmente, el FVM se basa en descomponer la totalidad del dominio en celdas que también son consideradas volúmenes de control, para plantear la ecuación de balance integral en cada subdominio. De esta manera se obtiene un sistema de ecuaciones cuyas incógnitas son los valores medios en las celdas. Si bien esta práctica tiene menos variantes que FEM, preserva el comportamiento de los balances macroscópicos de MMC sin necesidad de aplicar restricciones numéricas.

Por lo tanto, una gran cantidad de códigos CFD emplean FVM por ser inherentemente conservativa, aplicable a mallas no estructuradas mediante implementaciones relativamente sencilla. Los dos códigos empleados en esta tesis, OpenFOAM® y Basilisk, se basan en este método numérico. En las secciones siguientes se da un análisis más detallado de la técnica, basado en las descripciones dadas en [1, 74, 102].

4.2. Fundamentos del Método de Volúmenes Finitos

Dado el balance integral de una propiedad, el mismo es válido tanto para el volumen de control total (el dominio Ω) como para cada elemento de la descomposición discreta

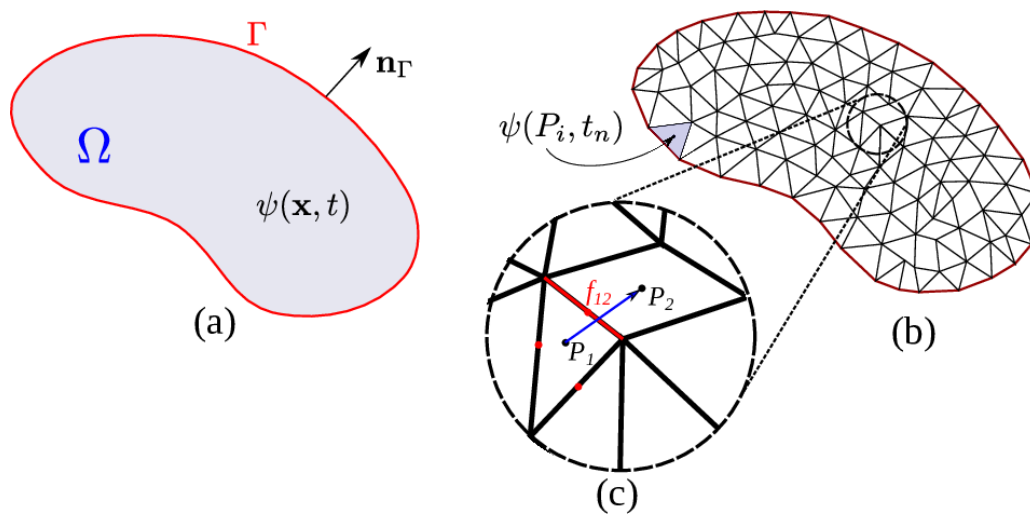


Figura 4.1: Dominio continuo Ω (a), malla no estructurada (b) y detalle de celdas vecinas (c)

del dominio, llamados usualmente *celdas*. De forma general, el volumen de control puede ser estático o móvil con respecto a un dado marco de referencia. Por simplicidad, el desarrollo siguiente considera el balance de una cantidad tensorial arbitraria $(\rho \psi)$ en un volumen de control estático Ω donde se conoce el campo de velocidades \mathbf{u} ,

$$\int_{\Omega} \frac{\partial(\rho \psi)}{\partial t} d\Omega = - \int_{\Gamma} \rho \psi \mathbf{u} \cdot d\Gamma + \int_{\Omega} S_{\Omega} d\Omega + \int_{\Gamma} F_{\Gamma} \cdot d\Gamma, \quad (4.1)$$

donde Γ es la frontera de Ω , $d\Gamma$ es el vector diferencial normal a la frontera, S_{Ω} es una fuente volumétrica y F_{Γ} es el flujo difusivo que egresa o ingresa al volumen de control a través de la frontera Γ . La Ecuación (4.1) plantea que el total de la variación temporal de la cantidad extensiva $(\rho \psi)$ dentro del dominio Ω es igual a la suma de las ganancias o pérdidas de esta cantidad dentro del dominio debido a su transporte por convección o difusión y a su creación o destrucción por los términos fuentes.

En el método de los volúmenes finitos, se discretiza el dominio Ω en un conjunto de celdas o “volúmenes finitos” P_i los cuales no se solapan y en su unión aproximan el dominio Ω ,

$$\Omega = \bigcup_i P_i \quad \wedge \quad P_i \cap P_j = \emptyset \quad \forall i, j \ (i \neq j). \quad (4.2)$$

Las celdas P pueden asumir cualquier geometría, por simplicidad generalmente se utilizan poliedros convexos. El balance de $(\rho \psi)$ se aplica sobre cada una de las celdas P_i ,

$$\int_{P_i} \frac{\partial(\rho \psi)}{\partial t} dV = - \int_{\partial P_i} \rho \psi \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} + \int_{\partial P_i} \mathbf{F}_{\partial P_i} \cdot d\mathbf{A} + \int_{P_i} \mathbf{S}_{P_i} dV \quad \forall P_i \in \Omega \quad (4.3)$$

donde ∂P_i es la frontera de P_i , \mathbf{u} es el campo velocidad que transporta a ψ , $d\mathbf{A}$ es el vector diferencial normal a ∂P_i . Los flujos $\mathbf{F}_{\partial P_i}$ corresponden al transporte difusivo de la propiedad y \mathbf{S}_{P_i} corresponde a los términos fuente. Dado a que las celdas P_i son poliedros, su frontera consiste en un conjunto de caras planas K_i ¹ tales que,

$$\partial P_i = \bigcup_i K_i \quad \wedge \quad K_i \cap K_j = \emptyset \quad \forall i, j \ (i \neq j). \quad (4.4)$$

¹ Cabe notar que esta aproximación implica también aproximar la frontera del dominio como un conjunto de caras planas, como se muestra en la figura 4.1

por lo tanto las integrales de superficie se expresan como la sumatoria de integrales sobre las caras K_i del poliedro,

$$\int_{P_i} \frac{\partial(\rho \psi)}{\partial t} dV = - \sum_{K_j \in P_i} \int_{K_j} \rho \psi \mathbf{u} \cdot d\mathbf{A} + \sum_{K_j \in P_i} \int_{K_j} F_{K_j} \cdot d\mathbf{A} + \int_{P_i} S_{P_i} dV \quad (4.5)$$

$\forall P_i \in \Omega$

Las Ecuación (4.5) planteada en cada celda define un sistema de n ecuaciones, siendo n el número de celdas en el dominio Ω . En un Método de Volúmenes Finitos colocados en celdas, las n incógnitas del sistema se consideran localizadas en los centroides x_P de celda,

$$\int_{P_i} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{P_i}) dV = 0 \quad \forall P_i \quad (4.6)$$

En este contexto, es necesario definir expresar cada término en la Ecuación (4.5) en función de los incógnitas ψ_{P_i} . Así, existen tres tipos de términos a discretizar: las integrales de volumen, las integrales de superficie y la derivada temporal.

4.2.1. Discretización de las integrales de volumen

Para discretizar las integrales de volumen de una cantidad ψ dentro de una celda P ,

$$\int_P \psi(\mathbf{x}) dV, \quad (4.7)$$

si se considera un campo $\psi(\mathbf{x})$ suave, puede emplearse la aproximación de Taylor de primer orden centrada en el centro de celda \mathbf{x}_P ,

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}_P + \Delta\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}_P) + (\Delta\mathbf{x})^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_P) + r(\Delta\mathbf{x}), \quad (4.8)$$

en donde $\Delta\mathbf{x} = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)$ es el vector que une cualquier punto con el centroide de celda y $r(\Delta\mathbf{x})$ es el error de truncamiento o residuo el cual es proporcional a la segunda potencia de $\Delta\mathbf{x}$ y a la norma de la matriz Hessiana de la función ψ evaluada en un punto \tilde{x} perteneciente a la bola $B(\mathbf{x}_P, \Delta\mathbf{x})$,

$$r(\Delta\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (\Delta\mathbf{x})^T \cdot H(\tilde{x}) \cdot (\Delta\mathbf{x}) \quad \tilde{x} \in B(\mathbf{x}_P, \Delta\mathbf{x}). \quad (4.9)$$

Debido a que el error es proporcional a la segunda potencia de la distancia $\Delta\mathbf{x}$ suele decirse que la aproximación discreta es de segundo orden.

Reemplazando la Ecuación (4.8) en (4.7) y considerando la propiedad definida en (4.6):

$$\begin{aligned}
 \int_{P_i} \psi(\mathbf{x}) dV &\approx \int_{P_i} \psi(\mathbf{x}_P) + (\Delta \mathbf{x})^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_P) dV \\
 &= \psi(\mathbf{x}_P) \int_{P_i} dV + \left[\int_{P_i} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_P)^T dV \right] \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_P) \\
 &= \psi(\mathbf{x}_P) V_{P_i}
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Cabe notar que, como ψ es suave, la aproximación empleada es equivalente a considerar el valor medio de $\tilde{\psi}$ como valor en la celda. Por lo tanto, una discretización genérica consistente con el desarrollo anterior es

$$\tilde{\psi} = \frac{1}{V_P} \int_P \psi(\mathbf{x}) dV \longrightarrow \tilde{\psi} = \psi(\mathbf{x}_P). \tag{4.11}$$

La ventaja de la formulación en valores medios es que puede aplicarse a campos discontinuos, aunque en este caso pierde la precisión de segundo orden en las celdas atravesadas por la discontinuidad.

4.2.2. Discretización de las integrales de superficie

La integral de superficie sobre una cara K_i de una cantidad $\psi(\mathbf{x})$ se expresa como,

$$\int_{K_i} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{A}, \tag{4.12}$$

La cara K_i es compartida por dos celdas, las cuales se denominan de forma relativa como P_1 y P_2 . Las implementaciones más sencillas suelen emplear formulaciones compactas, donde el valor en (4.12) se expresa sólo en función de los valores en las celdas adyacentes: ψ_{P_1} y ψ_{P_2} , como se muestra en el detalle (c) de la Figura 4.1. Bajo este concepto, se considera una variación espacial lineal de la función $\psi(\mathbf{x})$, dada por aproximación de Taylor centrada sobre cualquier punto intermedio del segmento que une los centroides de las celdas P_1 y P_2 , $\mathbf{x}_{12} \in [\mathbf{x}_{P_1}, \mathbf{x}_{P_2}]$:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}_{12}) + (\Delta \mathbf{x}_{12})^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{12}) + r(\Delta \mathbf{x}_{12}), \tag{4.13}$$

en donde $\Delta \mathbf{x}_{12} = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{12})$. El teorema del valor medio asegura que existe un punto en $[\mathbf{x}_{P_1}, \mathbf{x}_{P_2}]$ donde la derivada de $\psi(\mathbf{x})$ en dirección paralela al segmento guarda la siguiente relación:

$$\frac{(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})^T}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{12}) = \frac{\psi_{P_2} - \psi_{P_1}}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|}. \tag{4.14}$$

Por otra parte, cualquier punto puede aproximarse por el polinomio de Taylor centrado en \mathbf{x}_{12} . Considerando en particular al punto intersección del segmento $[\mathbf{x}_{P_1}, \mathbf{x}_{P_2}]$ con la cara K_i , denominado \mathbf{x}_{f_i} , puede obtenerse la aproximación de Taylor centrada en P_1 siguiente,

$$\psi(\mathbf{x}_{f_i}) = \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \left\| (\mathbf{x}_{f_i} - \mathbf{x}_{P_1}) \right\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\left\| (\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1}) \right\|} + r(\Delta x_{12}) + r(\mathbf{x}_{P_1} - \mathbf{x}_{12}) \quad (4.15)$$

Con el objetivo de expresar la integral de superficie a partir del valor del centroide \mathbf{x}_K , se propone expresarlo como una serie de Taylor centrada en el punto \mathbf{x}_{f_i} ,

$$\psi(\mathbf{x}_K) = \psi(\mathbf{x}_{f_i}) + \Delta x_{f_i}^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{f_i}) + r(\Delta x_{f_i}) \quad (4.16)$$

Si se reemplaza la expresión dada en (4.15) en (4.16) se obtiene la expresión del valor de centroide de cara como función de los valores de celda ψ_{P_1} y ψ_{P_2} ,

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{x}_K) = & \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \left\| (\mathbf{x}_{f_i} - \mathbf{x}_{P_1}) \right\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\left\| (\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1}) \right\|} + r(\Delta x_{12}) \\ & + \Delta x_{f_i}^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{f_i}) + r(\mathbf{x}_{P_1} - \mathbf{x}_{12}) + r(\Delta x_{f_i}). \end{aligned} \quad (4.17)$$

De forma análoga a lo planteado en la discretización de las integrales de volumen, la integral sobre la cara se puede aproximar a segundo orden por medio del valor en el centroide de la cara:

$$\int_{K_i} \psi(\mathbf{x}) d\mathbf{A} \approx \psi(\mathbf{x}_K) \mathbf{A}_K \quad (4.18)$$

donde \mathbf{A}_K es un vector normal a la cara K cuya magnitud es igual al área. Considerando la expresión obtenida en la eq: (4.17) se puede aproximar el valor de $\psi(\mathbf{x}_K)$ a segundo orden como,

$$\psi(\mathbf{x}_K) \approx \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \left\| (\mathbf{x}_{f_i} - \mathbf{x}_{P_1}) \right\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\left\| (\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1}) \right\|} + \Delta x_{f_i}^T \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}_{f_i}) \quad (4.19)$$

Si se considera que el centroide de la cara coincide con el punto \mathbf{x}_{f_i} entonces la expresión anterior se reduce a,

$$\psi(\mathbf{x}_K) \approx \psi(\mathbf{x}_{P_1}) + \left\| (\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P_1}) \right\| \cdot \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\left\| (\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1}) \right\|}. \quad (4.20)$$

Reemplazando la eq: (4.20) en eq: (4.18) se resuelve la integral de superficie como función de los valores de celdas adyacentes por medio de la siguiente expresión:

$$\int_{K_i} \psi(\mathbf{x}) dA, \approx \psi(\mathbf{x}_{P_2}) \left(1 - \frac{\|(\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P_2})\|}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} \right) A_K + \psi(\mathbf{x}_{P_1}) \frac{\|(\mathbf{x}_K - \mathbf{x}_{P_2})\|}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} A_K. \quad (4.21)$$

Esta fórmula es equivalente a una interpolación lineal utilizando como gradiente una aproximación por diferencias centrada, equivalente a la fórmula (4.17). Sin embargo, es importante notar que todos los fuentes de error son desviaciones de primer orden que crecen con la aparición de defectos geométricos en la malla (no ortogonalidad, *skewness*). En la Ecuación (4.5) se observa que existen dos tipos de integrales en caras a discretizar: los flujos difusivos y advectivos.

Flujos difusivos

Los términos de difusión en una ecuación de balance suelen involucrar un coeficiente de difusión (k_ψ) y gradientes de la propiedad,

$$\int_A F_k d\mathbf{A} = \int_A k_\psi (\nabla \psi) d\mathbf{A}. \quad (4.22)$$

Si bien es posible calcular el gradiente en caras interpolando valores de gradiente en celda, eso generaría moléculas de cálculo que involucren los valores de la variable en segundos vecinos [102]. Otra manera de estimar el valor de la integral es emplear la aproximación lineal del gradiente en la Ecuación (4.14). Sin embargo, esto sólo define la componente del gradiente en el sentido del segmento $[x_1, x_2]$. Por ende, para mallas no estructuradas es necesario considerar una corrección no ortogonal al flujo de

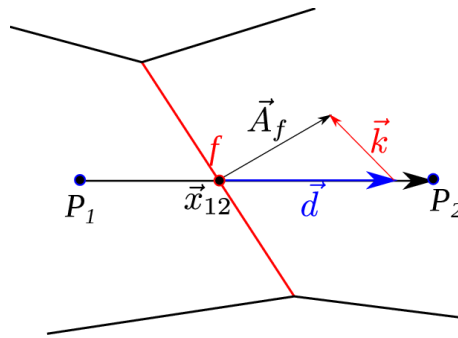


Figura 4.2: Descomposición de vector área para caras no ortogonales

manera que,

$$\begin{aligned} \int_{A_f} k_\psi (\nabla \psi) \cdot \mathbf{dA} &= k_\psi (\nabla \psi)_f \cdot \mathbf{A}_f \\ (\nabla \psi)_f \cdot \mathbf{A}_f &= \mathbf{d} \frac{(\psi_{P_2} - \psi_{P_1})}{\|(\mathbf{x}_{P_2} - \mathbf{x}_{P_1})\|} + \mathbf{k} (\nabla \psi)_f^{corr} \end{aligned} \quad (4.23)$$

donde \mathbf{d} y \mathbf{k} son las componentes de una descomposición particular del vector \mathbf{A}_f , como se indica en la Figura 4.2.

Descripciones más detalladas sobre este procedimiento y su efecto en la precisión del FVM pueden encontrarse en [74, 102, 108]. A fines de esta tesis es importante considerar dos cuestiones relacionadas a la corrección no ortogonal. Por un lado, el valor $(\nabla \psi)_f^{corr}$ debe computarse iterativamente y, por lo tanto, puede incrementar el costo computacional de la simulación. Por otra parte, esta corrección introduce otra aproximación de primer orden que puede reducir la precisión general del método numérico.

En resumen, el cálculo de términos difusivos en FVM considerado se basa en el uso de diferencias centradas. Esta aproximación es estable y de segundo orden para mallas cartesianas, pero en mallas no estructuradas requiere correcciones que reducen su precisión.

Flujos advectivos

En cuanto al transporte advectivo, conocido el flujo másico a través de la cara ($\phi_f = \rho \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{A}_f$), sólo resta interpolar la variable ψ para calcular el flujo,

$$\int_A \rho \psi \mathbf{u} dA = \phi_f \psi_f \quad (4.24)$$

El cálculo de ψ_f se realiza mediante interpolación de los valores en las celdas adyacentes. El *stencil* empleado en dicha interpolación suele llamarse *esquemas de advección*. Una alternativa es aplicar interpolación lineal en la cara que es equivalente a utilizar la aproximación de diferencias centradas (CD) dada en la Ecuación (4.16). Si bien esta interpolación es de segundo orden, puede inducir oscilaciones numéricas y soluciones no físicas [59, 183, 108]. Una alternativa es considerar que el valor en la cara es igual al valor de la celda de donde proviene el flujo o “aguas arriba”; este esquema, llamado *upwind difference* (UD), es más estable que CD pero introduce un error numérico difusivo. A fin de lograr soluciones estables y de precisión superior a UD, se han desarrollado esquemas de advección más avanzados. Los esquemas de alta resolución (*High Resolution Schemes*, HRS), por ejemplo, se basan en limitar el valor

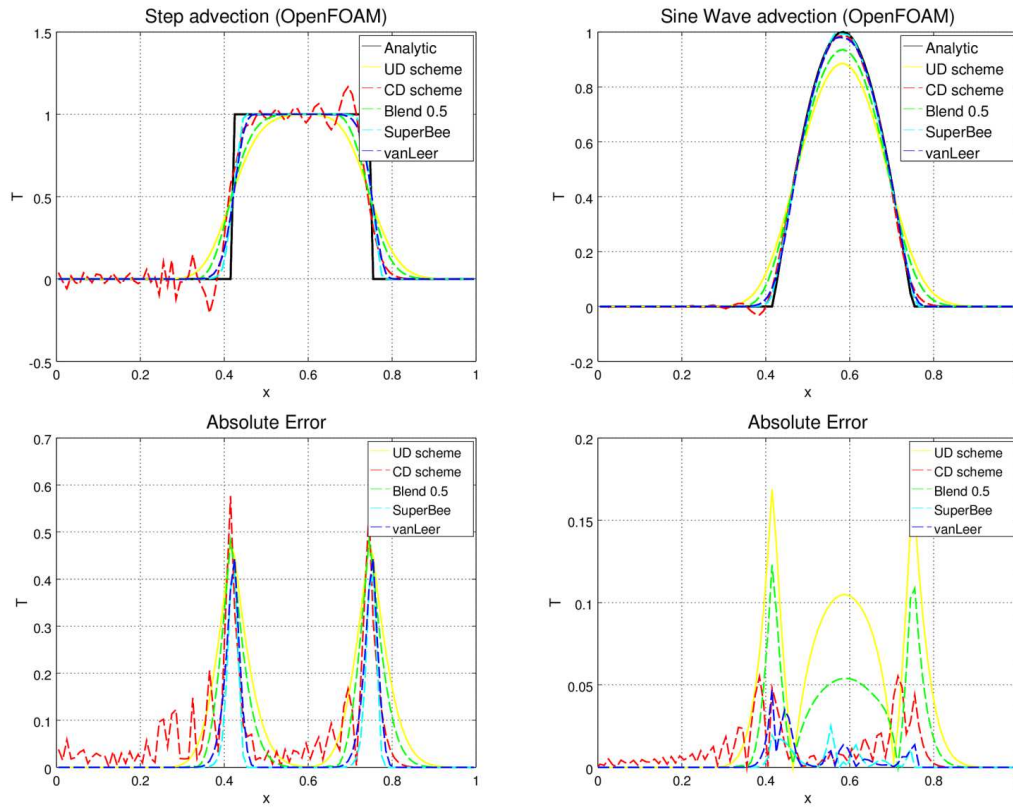


Figura 4.3: Problema de de advección pura 1D: Soluciones (arriba) y errores (abajo): pulso cuadrado (izquierda) y una onda sinusoidal (derecha).

CD de gradiente en la cara agregando difusión numérica en función de los valores de las celdas adyacentes. La descripción matemática detallada de esta técnica, basada en la teoría de esquemas tipo TVD (*Total Variation Diminishing*) puede encontrarse en el capítulo 2 de [102] o en el capítulo 12 de [108]. La desventaja de esta técnica es que reduce la precisión del método numérico. A modo de ejemplo, la Figura 4.3 presenta soluciones numéricas (y sus errores) para dos problemas de advección resueltos con diversos esquemas de numéricos. Puede observarse que el uso de diferencias centradas (*CD scheme*) provoca oscilaciones en los puntos de discontinuidad. Por otra parte, un esquema *upwind* de primer orden difunde el campo solución provocando un error considerable. Si bien los esquemas TVD (van Leer y SuperBee) empleados reducen el error significativamente para el pulso sinusoidal, ningún esquema tiene una buena performance en el caso de pulso cuadrado.

Otra alternativa es emplear polinomios de interpolación de alto orden, como por ejemplo los esquemas como QUICK [88] o WENO [96]. Si bien esto preserva la precisión de la solución, no garantiza la misma estabilidad que los HRS y produce sistemas computacionalmente más costosos. OpenFOAM®, por ejemplo, cuenta

con una amplia gama de esquemas TVD, tanto HRS como esquemas basados en interpolaciones de orden superior (como QUICK). Basilisk aplica, en cambio, un único esquema explícito de segundo orden definido por Bell, Collela y Glaz [12] (BCG) como se indica en la Ecuación (4.25) para un caso de advección pura. Este esquema garantiza un buen grado de estabilidad y segundo orden de precisión para mallas cartesianas, utilizando sólo información de los vecinos a la cara.

$$\psi_f^{BCG} = \psi_{P_1} + \left(S_{P_1}^\psi + S_{P_2}^\psi \right) \frac{\Delta t}{4} + s \left(1 - s \frac{u_f^n \Delta t}{\Delta x} \right) (\nabla \psi)_f \cdot \mathbf{n} \frac{\Delta x}{2} \quad (4.25)$$

$$\begin{cases} s = 1 & \phi > 0 \\ s = 0 & \phi = 0 \\ s = -1 & \phi < 0 \end{cases}$$

$$(\rho \psi)_P^{n+1} = (\rho \psi)_P^n + \Delta t \sum \rho_f (\mathbf{u}_f \cdot \mathbf{A}_f) \psi_f^{BCG}$$

donde la aproximación de Taylor de ψ en la cara considera una interpolación temporal explícita de segundo orden para los términos fuente S^ψ .

En el marco de FVM centrado en celdas, es importante recordar que los esquemas de advección deben ser de segundo orden para la precisión del método, manteniendo también un comportamiento estabilidad.

4.2.3. Discretización temporal

Cuando el problema a resolver es transitorio, las variables evolucionan en el tiempo a partir de una condición inicial. Por lo tanto, el campo solución debe calcularse en cada instante t . De esta manera, la selección de instantes a resolver corresponde a tomar puntos de la línea temporal y por lo tanto equivale a una discretización por FDM. En este contexto es conveniente plantear la ecuación de transporte 4.5 de la siguiente manera,

$$\frac{\rho_P^{n+1} \psi_P^{n+1} V_P^{n+1} - \rho_P^n V_P^n \psi_P^n}{t^{n+1} - t^n} = f(\psi_{P,N}^{n+k}), \quad (4.26)$$

donde $f(\psi_{P,N}^{n+k})$ concentra todas las operaciones diferenciales espaciales discretizadas como se describió en la secciones anteriores. Cabe entonces notar que el valor en la celda P depende del campo ψ no sólo en ella sino también en sus vecinos N .

Existe una amplia variedad de técnicas de integración numérica temporal [80, 44, 108, 183]. Una de las clasificaciones más generales divide a los métodos en explícitos e implícitos. Los primeros utilizan sólo del paso ya resuelto ψ^n para calcular el valor futuro ψ^{n+1} , mientras que los métodos implícitos se basan en reescribir la Ecuación

(4.26) para todas las celdas en forma de un sistema lineal acoplado cuya solución sea el campo ψ^{n+1} .

Si bien la segunda metodología es más costosa, es ampliamente utilizada en la mayoría de códigos CFD debido a que presenta mejores propiedades de estabilidad. Por otra parte, al igual que para la discretización espacial, el error introducido por la aproximación de Taylor empleada para estimar ψ^{n+1} es proporcional a alguna potencia entera de Δt . En este sentido, es una práctica usual utilizar discretizaciones temporales del mismo orden o superior que las espaciales. En el contexto de FVM centrado en celdas, esto implica emplear formulaciones de segundo orden.

Uno de los esquemas de segundo orden más sencillos es el propuesto por Crank y Nicolson [28], que equivale a utilizar un valor medio estimado en el paso de tiempo que deriva del promedio entre el estado presente y el futuro, por lo que la técnica se clasifica como semi-implícita. Para un problema a densidad constante con malla fija, la expresión 4.26 se reduce a,

$$\psi_P^{n+1} = \psi_P^n + \Delta t \frac{f(\psi_{P,N}^n) + f(\psi_{P,N}^{n+1})}{2}. \quad (4.27)$$

Este método es muy utilizado para resolver problemas difusivos debido a que al ser condicionalmente estable [59] permite elevar significativamente el paso de tiempo a un costo computacional relativamente bajo y sin necesidad de almacenar información auxiliar.

Otra forma de mantener el orden superior de la integración temporal es emplear aproximaciones del tiempo futuro basadas en valores de varios instantes pasados,

$$\psi_P^{n+1} = \psi_P^n + \Delta t \left[\gamma_{n-1} f(\psi_{P,N}^{n-1}) + \gamma_n f(\psi_{P,N}^n) + \gamma_{n+1} f(\psi_{P,N}^{n+1}) \right]. \quad (4.28)$$

donde los coeficientes γ determinan el peso de cada paso de tiempo en la estimación de la derivada temporal. Esta familia de métodos, conocidos como métodos de Adam-Bashford, presentan mejores propiedades de estabilidad y pueden generalizarse para cualquier orden de precisión que se desee. Sin embargo, requieren almacenar los valores pasados de las variables y por lo tanto sus requerimientos computacionales son mayores que Crank-Nicolson.

4.2.4. Sistema de ecuaciones lineales

Aplicadas las operaciones de discretización al balance integral de la Ecuación (4.5) se genera un sistema de ecuaciones lineales de la forma siguiente,

$$\sum_j a_{ij} \psi_j = b_i \quad \forall P_i \in \Omega, \quad (4.29)$$

donde a_{ij} son los coeficientes que afectan a los valores incógnita por celda ψ_j y b_i es el término independiente asociado a la celda i . El sistema de ecuaciones definido en la Ecuación (4.29) posee \mathcal{N} ecuaciones y \mathcal{N} incógnitas. Con el fin de reducir la complejidad computacional, se busca que la matriz de coeficientes a_{ij} tenga la mayor cantidad de ceros posible, a fin de reducir el número de operaciones al momento de realizar multiplicaciones matriz-vector. En este sentido, cada ecuación en (4.29) involucra solamente los valores de ψ en la celda P y sus vecinas, es decir, aquellas celdas que comparten con P una de sus caras. El balance discreto sobre cada una de las celdas P se puede expresar como:

$$a_{PP} \psi_P + \sum_N a_{PN} \psi_N = b_P \quad \forall P \in \Omega, \quad (4.30)$$

donde el subíndice N identifica las celdas vecinas a P . Dado que esta formulación incluye solamente primeros vecinos se la denomina discretización de *stencil* compacto.

La matriz de coeficientes resultante es *sparse* o rala, es decir, la mayoría de sus coeficientes son nulos. Esto favorece el uso de métodos iterativos de resolución de sistemas lineales (*e. g.* Jacobi, Gauss-Seidel, Gradiente Conjugado) [44, 183]. En particular, los métodos multigrilla son eficientes en problemas elípticos (por ejemplo un problema de Poisson), especialmente si el paso de malla es reducido en comparación con las dimensiones del dominio.

Así, cabe destacar que OpenFOAM® cuenta con un amplio repertorio de *solvers lineales* [112] para resolver problemas hiperbólicos, parabólicos y elípticos en mallas con diversas estructuras. Basilisk, en cambio, sólo cuenta con un método multigrilla para resolver sistemas de Helmholtz derivados de problemas difusivos.

4.3. Resolución de Navier-Stokes por FVM

A partir del desarrollo en el Capítulo 3, las Ecuaciones de Navier-Stokes para flujos Newtonianos incompresibles a una fase pueden expresarse como:

$$\frac{\partial(\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} + \rho \mathbf{g} \quad (4.31)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4.32)$$

donde las variables independientes son los campos de velocidad (\mathbf{u} , de tres componentes) y de presión (p , escalar). El sistema presenta las siguientes particularidades:

- La Ecuación (4.32) es escalar, pero en ella sólo está presente la incógnita vectorial \mathbf{u} .
- La Ecuación (4.31) es vectorial y en ella actúan todas las incógnitas, definiendo el acoplamiento entre los campos p - \mathbf{u} .
- Asimismo, esta ecuación incluye un término no-lineal (advección) que debe aproximarse linealmente para definir un sistema algebraico.

El sistema de ecuaciones resultante de aplicar FVM puede resolverse utilizando algoritmos *monolíticos* o *segregados*. En el primer caso, se plantea el sistema de ecuaciones completo, tomando como incógnitas los valores por celda de cada componente de velocidad y presión de forma simultánea, preservando el acoplamiento entre las variables. Sin embargo, el sistema completo tiene una estructura de bandas amplia, lo que genera un mal condicionamiento e incrementa el tiempo de cálculo [44].

Los algoritmos segregados, en cambio, resuelven primero un subconjunto de las ecuaciones (por ejemplo, el balance de momento) y luego corrigen la solución obtenida para que satisfaga el resto del sistema. Este es el caso del método de la proyección [24], del cual se han derivado luego diversos algoritmos, entre ellos SIMPLE [125] y PISO [68, 69]. La desventaja de este enfoque radica en la necesidad de iterar la resolución de sistemas hasta alcanzar la convergencia a una solución común. Sin embargo, debido a que los sistemas resultantes se encuentran mejor condicionados y a que la no linealidad de la convección también requiere iterar la resolución del sistema, los métodos segregados suelen ser más eficientes en problemas donde el acoplamiento presión-velocidad no es dominante.

4.3.1. Métodos segregados en mallas colocadas

Aplicando el FVM a las ecuaciones (4.31) y (4.32), se obtiene el siguiente conjunto de ecuaciones para cada celda,

$$(b_P + a_P) \mathbf{u} + \sum_N (a_N \mathbf{u}_N) = -\nabla p_P + \mathbf{f} + b_P \mathbf{u}_P^0 \quad (4.33)$$

$$\sum_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f = 0 \quad (4.34)$$

donde ∇p_P y \mathbf{f} son las representación discretas del gradiente de presión y las fuerzas de cuerpo. El término temporal se representa por la parte explícita $b_P \mathbf{u}_P^0$ y la implícita $b_P \mathbf{u}_P$. Los coeficientes a_P y a_N representan los aportes discretizados de los términos advectivos y difusivos para la celda P y sus vecinos N respectivamente. Es importante observar que dicho proceso incluye también la linealización de los flujos advectivos. El procedimiento detallado de cómo calcular cada coeficiente para mallas arbitrarias puede hallarse en [108].

Así, planteando la Ecuación 4.33 para todas las \mathcal{N} celdas se obtiene un sistema de $3\mathcal{N}$. Luego, puede reescribirse la Ecuación 4.34 en términos de los valores en celdas,

$$\mathbf{d}_P \cdot \mathbf{u}_P + \sum_N \mathbf{d}_N \cdot \mathbf{u}_N = 0 \quad (4.35)$$

donde \mathbf{d}_P y \mathbf{d}_N resultan de agrupar por celdas los coeficientes de interpolación a cada cara de P [108]. Así, se arriba a un sistema cerrado de $4\mathcal{N}$ incógnitas que puede expresarse matricialmente por bloques de la forma siguiente,

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_F & \mathbf{G} \\ \mathbf{D} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_b \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

donde \mathbf{A}_F representa los términos en el lado izquierdo de (4.33) para todas las celdas. De forma similar, \mathbf{G} y \mathbf{D} los operadores gradiente y divergencia discretos evaluados para cada celda P . Finalmente, el vector \mathbf{f}_b agrupa de todos los términos fuentes de la Ecuación (4.33). El bloque inferior derecho de la matriz es nulo debido a que p no participa de la ecuación de continuidad. Asimismo, el $\mathbf{0}$ del término independiente muestra que el balance de masa es una ecuación homogénea.

4.3.2. Método de proyección aproximada

En sus trabajos, Chorin [23, 24] define una estrategia de resolución segregada para el sistema (4.36) conocida como método de la proyección. El concepto se basa en obtener una primera aproximación del campo de velocidad y luego proyectarla en el espacio de campos solenoidales, a fin de cumplir la restricción de divergencia nula [52].

El principio se basa en el Teorema de Helmholtz, por el cual cualquier campo vectorial suave (\mathbf{w}) puede representarse como suma entre un campo de divergencia nula (\mathbf{u}) y un campo irrotacional definido por un potencial escalar ($(\nabla\phi)$). Así,

$$\mathbf{w} = \mathbf{u} + (\nabla\phi) \longrightarrow \mathbf{u} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} (\nabla p), \quad (4.37)$$

donde \mathbf{u} es el campo solenoidal, que en el contexto de Navier-Stokes será la velocidad que cumpla la conservación de masa. El campo $\mathbf{w} = \mathbf{u}^*$ es una aproximación del campo velocidad que puede obtenerse como solución de la ecuación parcial de momento,

$$\mathbf{u}^*_P = \frac{\sum_N \mathbf{u}^*_N + \mathbf{f} + b_P}{b_P + a_P}, \quad (4.38)$$

donde los términos del RHS excluyen explícitamente al gradiente de presión, dado que este término será empleado como componente potencial. Así, aplicando el operador divergencia en la Ecuación (4.37) se obtiene un problema de Poisson para la presión:

$$\nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho} \nabla p \right) = \nabla \cdot (\mathbf{u}^*) \longrightarrow u_f = u_f^* - \frac{\Delta t}{\rho} \partial_f p, \quad (4.39)$$

donde la corrección se aplica en las caras de la celda, sólo en el sentido de la componente normal, para garantizar el balance de masa a nivel discreto ($\sum_f \mathbf{u} \cdot \mathbf{A}_f = 0$). La corrección en centro de celda (i) se realiza considerando el gradiente de presión interpolado de sus caras ($i \pm \frac{1}{2}$),

$$(\partial_x p)_i = \frac{1}{2} \left[(\partial_x p)_{i+\frac{1}{2}} + (\partial_x p)_{i-\frac{1}{2}} \right]. \quad (4.40)$$

Esta formulación, empleada en Gerris y Basilisk, es un ejemplo de una aplicación *Fractional Step* del método de la proyección. El sistema diferencial equivalente sería

el siguiente,

$$\rho \left(\frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} \nabla \cdot (\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}}) \right) = \nabla \cdot [\mu^{n+\frac{1}{2}} (\mathbf{D}^n + \mathbf{D}^*)] \quad (4.41)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{n+\frac{1}{2}} \right) = \nabla \cdot (\mathbf{u}^*) \quad (4.42)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho} \nabla p^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.43)$$

donde el supraíndice $n + \frac{1}{2}$ indica una aproximación explícita de la evolución temporal que considera sólo la aceleración local a^n ($\mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}} = \mathbf{u}^n + (\Delta t/2)a^n$) [133]. En la predicción de velocidad \mathbf{u}^* calculada en la Ecuación (4.41), no obstante, el aporte difusivo se calcula de forma implícita, utilizando métodos multigrilla. Por otra parte, la difusividad en el problema de Poisson para la presión sólo tiene en cuenta la discretización del término temporal en la ecuación de momento.

Analizando el proceso de segregación a partir del sistema acoplado (4.36), el algoritmo puede expresarse como las siguientes operaciones matriciales,

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^* &= \mathbf{A}_F^{-1} \mathbf{f}_b \\ \mathbf{D} \tilde{\mathbf{A}}_F^{-1} \mathbf{G} \mathbf{p} &= \mathbf{D} \mathbf{u}^* \\ \mathbf{u} &= \mathbf{u}^* - \tilde{\mathbf{A}}_F^{-1} \mathbf{G} \mathbf{p} \end{aligned} \quad (4.44)$$

donde $\tilde{\mathbf{A}}_F$ es una aproximación de la matriz de momento, para esta formulación del FSM $\tilde{\mathbf{A}}_F = \rho / (\Delta t)$.

4.3.3. Generalización de los métodos de proyección

Otra alternativa para obtener un sistema aproximado a (4.36) es descomponer la matriz \mathbf{A}_F en sus coeficientes diagonales \mathbf{A}_P y no diagonales \mathbf{H} ($\mathbf{A}_F = \mathbf{A}_P + \mathbf{H}$). De esta forma, el sistema de ecuaciones puede aproximarse como:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{A}_P + \mathbf{H} & \mathbf{G} \\ \mathbf{D} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f}_b \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

donde los aportes no diagonales se concentran en \mathbf{H} . Para plantear el problema de Poisson, puede considerarse explícitamente el efecto de los términos no diagonales en (4.45),

$$\mathbf{D} \mathbf{A}_P^{-1} \mathbf{G} \mathbf{p} = \mathbf{D} \mathbf{A}_P^{-1} (\mathbf{f}_b - \mathbf{H} \mathbf{u}^*) \quad (4.46)$$

considerablemente menos costoso, ya que invertir la matriz diagonal \mathbf{A}_P involucra sólo \mathcal{N} operaciones algebraicas.

Reagrupando los términos independientes en la Ecuación (4.33), el balance de momento puede escribirse para cada celda como:

$$a_P \mathbf{u}_P + \sum_N a_N \mathbf{u}_N = \mathbf{f}_P - \nabla p_P \quad (4.47)$$

Dividiendo la ecuación por a_P puede despejarse el valor final \mathbf{u}_P ,

$$\mathbf{u}_P + \mathbf{H}_a(\mathbf{u}) = \mathbf{B}_P - \frac{1}{a_P} \nabla p_P \quad (4.48)$$

donde $\mathbf{B}_P = \mathbf{f}_P / a_P$ y $\mathbf{H}_a(\mathbf{u}) = \frac{\sum_N a_N \mathbf{u}_N}{a_P}$.

Luego, aplicando el operador divergencia discreto sobre esta ecuación, considerando $\nabla \cdot \mathbf{u}_P = 0$ por conservación de masa,

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{a_P} (\nabla p)_P \right] = \nabla \cdot [-\mathbf{H}_a(\mathbf{u}) + \mathbf{B}_P^v] \quad (4.49)$$

Las Ecuaciones (4.47) y (4.49) planteadas en cada celda generan dos sistemas algebraicos que son la base para una gran familia de métodos segregados. Originalmente, Patankar y Spalding [126] desarrollaron el método SIMPLE para la resolución de problemas estacionarios. Varias extensiones de este método han sido propuestas a fin de mejorar su robustez y precisión [178, 168, 138, 20, 163, 182, 2]. Asimismo, SIMPLE es también el punto de partida del algoritmo PISO, desarrollado por Issa [68] para problemas transitorios. La combinación PISO-SIMPLE da lugar al algoritmo PIMPLE; esta es la opción implementada en OpenFOAM[®], dado que por su versatilidad y robustez puede aplicarse en problemas fuertemente acoplados y no lineales en mallas arbitrarias, permitiendo en algunos casos el uso de mayores pasos temporales.

4.3.4. El algoritmo SIMPLE y derivados

El algoritmo SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) y sus derivados [126, 125, 178, 168, 167, 138, 21] son posiblemente la familia de algoritmos segregados de mayor uso en la actualidad en códigos de CFD [124, 108, 44, 183, 189, 5]. La mayoría de estos métodos han sido concebidos para la resolución de flujos estacionarios y luego han sido extendidos a problemas transitorios. Es por ello que, en general, estos métodos parten de la Ecuación (4.33) sin los términos temporales.

Así, el algoritmo SIMPLE estandar se compone de las siguientes etapas:

1. Iniciar el proceso iterativo tomando los campos de la iteración anterior como condiciones iniciales p^0 , \mathbf{u}^0 y los parámetros físicos, geométricos y condiciones de borde del problema en cuestión.
2. Discretizar y resolver la ecuación de momento con valores constantes del campo de presiones para una primer predicción del campo de velocidades \mathbf{u}^* mediante la Ec. (4.47):

$$a_P \mathbf{u}_P^* + \sum_N a_N \mathbf{u}_N^* = \mathbf{f}_P - \nabla p_P^0 \quad (4.50)$$

3. Calcular el operador $\tilde{\mathbf{H}}_a$ a partir del nuevo campo de velocidades \mathbf{u}^* :

$$\tilde{\mathbf{H}}_a = \frac{-\sum_N a_N \mathbf{u}_N^* + \mathbf{f}_P}{a_P} \quad (4.51)$$

4. Calcular la presión a partir de la Ec. (4.49):

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{a_P} (\nabla p_P^{**}) \right] = \nabla \cdot [\tilde{\mathbf{H}}_a(\mathbf{u}^*)] \quad (4.52)$$

5. Corregir las velocidades en centro de celda mediante:

$$\mathbf{u}_P^{**} = \tilde{\mathbf{H}}_a(\mathbf{u}^*) - \frac{\nabla p_P^{**}}{a_P} \quad (4.53)$$

6. Se vuelve al paso 2 con \mathbf{u}^{**} y p^{**} como valores iniciales, recalculando los coeficientes de las matrices en base a estos nuevos campos, y se itera hasta obtener una determinada tolerancia de residuos prescripta.

El algoritmo SIMPLE resuelto de esta manera, debido al tratamiento explícito de los términos en $\tilde{\mathbf{H}}_a$, puede ser inestable y no converger. Una práctica común para estabilizar el algoritmo es utilizar factores de relajación [74, 108, 106, 182]. Por otra parte, las extensiones del método mencionadas al comienzo de la sección consisten en emplear mejores aproximaciones de $\tilde{\mathbf{H}}_a$ a fin de mejorar la convergencia del método.

4.3.5. El algoritmo PISO

PISO (*Pressure Implicit with Splitting of Operators*) fue originalmente concebido para la resolución de flujos transitorios [68, 69]. El procedimiento es similar a SIMPLE, diferenciándose por reforzar el acoplamiento de la presión y la velocidad mediante múltiples iteraciones para el cálculo de la presión y la corrección de la velocidad. A esta etapa se la conoce como *paso corrector*.

La secuencia del algoritmo PISO se puede resumir de la siguiente forma:

1. Iniciar el proceso iterativo tomando los campos de la iteración anterior como condiciones iniciales p^0 , \mathbf{u}^0 y los parámetros físicos, geométricos y condiciones de borde del problema en cuestión.
2. Discretizar y resolver la ecuación de momento con valores constantes del campo de presiones para una primer predicción del campo de velocidades \mathbf{u}^* mediante la Ec. (4.47):

$$(b_P + a_P)\mathbf{u}_P^* + \sum_N a_N \mathbf{u}_N^* = \mathbf{f}_P + b_P \mathbf{u}_P^0 - \nabla p_P^0 \quad (4.54)$$

siendo b_P el coeficiente dado por la discretización del término temporal

3. Comienza el bucle del paso corrector:

- a) Calcular el operador $\tilde{\mathbf{H}}_a$ a partir del nuevo campo de velocidades \mathbf{u}^* :

$$\tilde{\mathbf{H}}_a = \frac{-\sum_N a_N \mathbf{u}_N^* + \mathbf{f}_P + b_P \mathbf{u}_P^0}{(a_P + b_P)} \quad (4.55)$$

- b) Calcular la presión a partir de la Ec. (4.49):

$$\nabla \cdot \left[\frac{1}{(a_P + b_P)} (\nabla p_P^{**}) \right] = \nabla \cdot [\tilde{\mathbf{H}}_a(\mathbf{u}^*)] \quad (4.56)$$

- c) Corregir las velocidades en centro de celda mediante:

$$\mathbf{u}_P^{**} = \tilde{\mathbf{H}}_a(\mathbf{u}^*) - \frac{\nabla p_P^{**}}{(a_P + b_P)} \quad (4.57)$$

- d) Se vuelve al paso 3.a con \mathbf{u}^{**} y p^{**} como valores iniciales y se itera hasta obtener una determinada tolerancia de residuos prescrita.

Este método mantiene el segundo orden de la integración temporal y permite prescindir del uso de relajación aplicando más pasos correctores. No obstante, la linealización de los términos convectivos impone un límite de estabilidad al paso de tiempo, dado por la condición CFL [44, 75].

4.3.6. El algoritmo PIMPLE

El método PISO-SIMPLE, también conocido como PIMPLE [189, 123], aplica una combinación de ambos algoritmos a fin de extender el paso de tiempo sin comprometer

la estabilidad. El algoritmo consiste en, para cada paso de tiempo, realizar varias iteraciones de SIMPLE (*outer iterations*) transitorio dentro de la cual se aplican varios pasos correctores de PISO (*inner iterations*).

De esta manera, las *outer iterations* actualizan la linealización del término no lineal $(\nabla \cdot \mathbf{uu})$ de forma iterativa. A su vez, las *inner iterations* refuerzan el acoplamiento presión-velocidad, mejorando la convergencia del sistema completo.

A modo de ejemplo, se describe el uso de este algoritmo para la resolución de flujos compresibles en el apéndice A. Cabe notar que en problemas de flujo compresible el acoplamiento entre variables (presión-velocidad-temperatura) es aún más complejo y afecta las propiedades del fluido (densidad y viscosidad). A su vez la propagación de ondas de presión y otras discontinuidades provocan evoluciones fuertemente no lineales con tiempos característicos muy diversos. Debido al nivel de rigidez del problema compresible, el uso de una estrategia de integración fuertemente iterativa como PIMPLE es vital para aplicar métodos segregados de resolución con pasos de tiempo extendidos.

4.4. Modelos de flujos multifásicos

El abordaje más directo para la simulación de un sistema multi-fluido consistiría en considerar las ecuaciones de conservación descritas en la Sección 3.1 para cada fase, aplicar las condiciones de salto correspondientes en las interfases y resolver el sistema de ecuaciones de todos los dominios (fases) de manera acoplada. Esta metodología está restringida sólo a casos académicos, debido al costo computacional de representar la interfase, su movimiento y todos los fenómenos de transferencia a partir de las ecuaciones diferenciales del continuo.

Por otra parte, la longitud característica de la interfase puede variar siendo más pequeña que el paso de malla o comparable con las dimensiones del dominio. De esta manera, las fases pueden encontrarse claramente separadas o uno de los fluidos puede formar pequeñas estructuras (gotas y burbujas) en el seno de la otra fase, como se observa en los ejemplos de la Figura 4.4. Debido a la gran variedad de casos de estudio, se han desarrollado diversas estrategias de modelado para flujos multifásicos a fin de abordar diferentes escenarios.

4.4.1. Modelado de fases dispersas

Si una de las fases se encuentra dispersa en estructuras pequeñas respecto a las dimensiones del dominio (partículas, gotas, burbujas), el costo de representar la geometría de la interfase será elevado. Por lo tanto, la estrategia usualmente adoptada

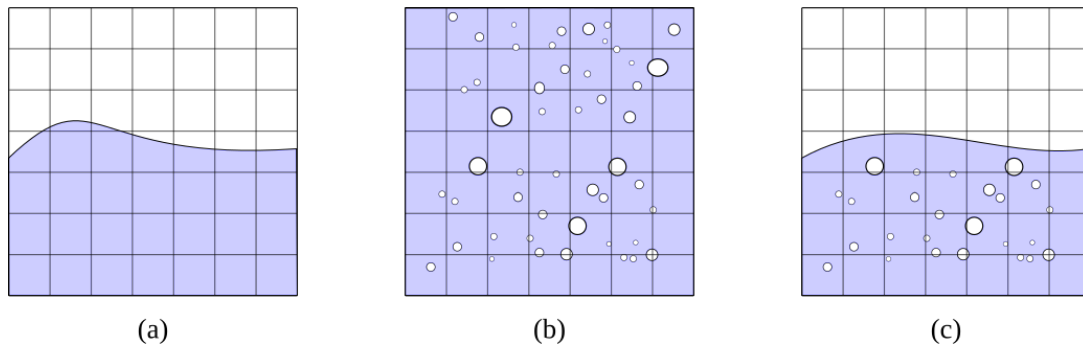


Figura 4.4: Diferentes escenarios de flujos multifásicos. Interfase resuelta por la malla (a), fase dispersa de longitud sub-grilla (b) y combinación de escalas(c). Adaptación de [102]

en problemas de ingeniería es resolver los balances diferenciales sólo para la fase continua, empleando una representación a parámetros concentrados de la fase dispersa a fin de considerar los fenómenos de transferencia entre fases. Esto último se logra mediante un modelo que acopla el flujo de la fase continua con las propiedades de estructuras dispersas. Bajo este concepto, las técnicas más difundidas son:

- *Discrete Droplet Model (DDM)* [35, 113, 142]: este método representa la fase dispersa mediante partículas Lagrangianas, dotando a cada una de propiedades como tamaño, posición y velocidad. El elemento representado puede ser tanto una gota (DDM) como una nube de gotas o parcela (*Discrete Parcel Model*, DPM). Si bien la representación Lagrangiana de una gota individual es más sencilla, el uso de DPM presenta la ventaja de requerir una cantidad de grados de libertad menor y por lo tanto su costo computacional es más reducido. Sin embargo, los modelos para representar una parcela son más complejos y difíciles de ajustar, requiriendo procesos de validación más extensos [10]. Como se describió en el Capítulo 2, este enfoque es uno de los más empleados para la representación de inyección en motores.
- *Modelo Euleriano Multifluido* [34, 67, 149]: Este enfoque representa toda las fases de manera simultánea en la malla, cada una con sus campos de flujo. De esta forma, se resuelven las ecuaciones de conservación para todas las fases de manera independiente. El acoplamiento entre fases se aplica mediante modelos para los fenómenos de transferencia, que dependen de las proporciones de cada fase en la celda. Es importante notar que en este paradigma de simulación la geometría de la interfase jamás se recupera, las fases se consideran totalmente interpenetradas. La desventaja de este método es que requiere de complejos modelos de acoplamiento que conllevan largos procesos de desarrollo y validación [180, 185].

- Modelo de mezcla [67, 102]: esta técnica resuelve los balances para un único fluido equivalente. En este contexto, se utiliza una variable auxiliar para indicar la proporción de fases en cada celda (fracción de volumen). Las propiedades equivalentes del flujo se calculan en función de la proporción entre fases y se aplican modelos para representar los fenómenos de interfase.
- *Eulerian Lagrangian Spray Atomization* (ELSA) [177, 85, 61]: esta técnica consiste en utilizar un modelo Euleriano en las regiones donde la fase dispersa forma estructuras de tamaño mayor al de la malla, transformando luego la fracción de volumen en partículas (modelo Lagrangiano) cuando las gotas se fragmentan en estructuras de menor tamaño.

En el contexto de la simulación de motores, los modelos del tipo DPM han sido empleados históricamente para la representación de las gotas de combustible. En la última década ha habido un importante desarrollo de ELSA [173, 62], sobre todo en los modelos Eulerianos que emplea. Sin embargo, el mapeo entre la representación Euleriana y la Lagrangiana sigue siendo un tema pendiente. A su vez, DPM ha demostrado un mejor desempeño para representar la región dispersa del *spray* que las opciones Eulerianas.

4.4.2. Representación geométrica de la interfase

En aplicaciones donde los fenómenos de interfase determinan la evolución del sistema, es necesario dar una descripción geométrica de la interfase. A grandes rasgos, los métodos pueden clasificarse según sean de seguimiento de interfase (*interface-tracking*) o de captura de interfase (*interface-capturing*). Una descripción detallada de las técnicas más extendidas de cada rama puede hallarse en [174], con sus ventajas, limitaciones y detalles de implementación. En general, estas técnicas se utilizan con la *formulación de un fluido*, considerando un único campo suave de velocidad para el cual se resuelven las Ecuaciones de Navier-Stokes (3.18), considerando las propiedades promediadas a partir de una fracción de volumen. En las secciones siguientes se realiza un breve resumen a fin de dar contexto el uso de la técnica empleada a lo largo de esta tesis: el método de Volumen de Fluido (VOF).

Seguimiento de interfase La primera familia de metodologías consiste en representar la interfase mediante un conjunto de puntos marcadores que pertenecen a la superficie libre. Una de las técnicas más populares que emplea esta filosofía es el *front-tracking* [174], representada en la Figura 4.5 (b). Cada punto se considera una partícula de continuo, que se advecta de acuerdo a las velocidades computadas en la malla. La

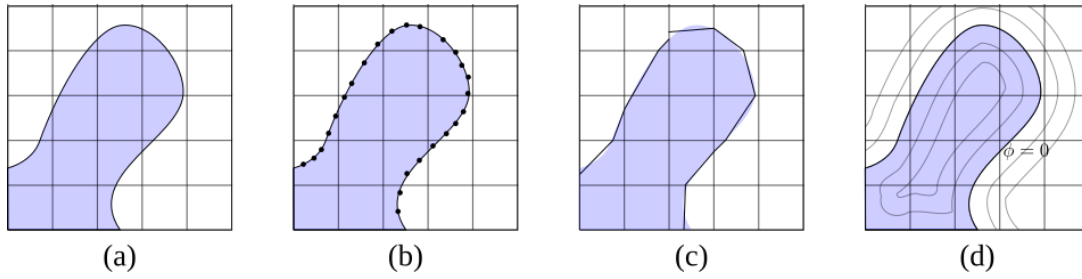


Figura 4.5: Representación de interfase por diversos métodos: exacta (a), *front-tracking* (b), VOF-PLIC (c), *Level-Set* (d). Adaptación de [174]

principal ventaja de esta metodología es que permite aumentar la resolución de la interfase independientemente del paso de malla. A su vez, la descripción explícita de la superficie permite computar las dimensiones de la interfase de manera directa, en particular de la curvatura (vital en problemas dominados por tensión superficial). Sin embargo, la técnica requiere de reglas definidas a priori para establecer la conectividad entre los marcadores de interfase, es decir, requiere modelos que determinen los cambios topológicos de la interfase. Este inconveniente es considerado la mayor desventaja del seguimiento de interfase.

4.4.3. Métodos de captura de interfase

Los métodos de captura de interfase, en cambio, se basan en emplear una función escalar para definir qué región del espacio está ocupada por cada fase del fluido. Dicha función evoluciona según una ecuación de transporte, determinando en cada instante de tiempo la topología de la interfase de forma implícita, sin necesidad de modelos heurísticos de conectividad.

Debido a la capacidad de describir cambios topológicos de la interfase sin necesidad de aplicar ningún modelo auxiliar, los métodos de captura son los más populares en problemas con fragmentación de la interfase. Las dos técnicas de *interface capturing* más extendidas son los métodos de Level-Set (**LS**) y Volume of Fluid (**VOF**). Cada una presenta sus ventajas: VOF conserva la masa de fluido sin necesidad de ninguna corrección y LS permite un cálculo eficiente y preciso de la curvatura. Sin embargo LS requiere de correcciones para asegurar la conservación local de masa. Es por esta razón que algunos autores, como [165] y [105] proponen métodos híbridos (**CLSVOF**), que acoplan LS y VOF, para desarrollar DNS de flujos multifásicos.

La principal desventaja de VOF es que se basa en la advección de un campo discontinuo. Esto lo hace particularmente susceptible a los errores numéricos del esquema de advección, perdiendo calidad en la reconstrucción de la interfase. En casos donde la tensión superficial es relevante, este inconveniente es particularmente crítico,

	VOF-PLIC	VOF algebraico	Level-Set
Marcador	Heaviside (c , discontinua)		Distancia (ϕ , continua)
Transporte	$\frac{\partial c}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot (\nabla c) = 0$		$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot (\nabla \phi) = 0$
Advección	Geométrica	Algebraica corregida	Algebraica
Masa	Inherente		Corrección explícita
Curvatura	Función altura	Divergencia de gradiente del marcador	

Cuadro 4.1: Resumen de comparación de las características de VOF (geométrico y algebraico) y Level-set

ya que la curvatura de la superficie libre define el valor de la fuerza de interfase. Sin embargo, el uso de esquemas de advección geométricos permite a VOF reducir la difusión de la interfase a niveles aceptables.

4.5. VOF geométrico lineal a trozos

Breve historia del desarrollo de VOF

A pesar de sus limitaciones, VOF es un método popular que a través de su larga historia se ha desarrollado en diversas variantes. En 1967, Batchelor [9] desarrolló en detalle las condiciones de salto para flujos multifásicos en una formulación que ya sugería el uso de una función color para definir la distribución de fases. Usando un concepto similar, Harlow y Welch [56] desarrollaron el método MAC (*marker and cell*) que empleaba partículas para localizar la fase principal. El uso de una función color comienza con el trabajo de Noh y Woodward [110], perfeccionado posteriormente por Hirt y Nicols [60], quienes proponen un esquema geométrico de advección basado en reconstrucción de la interfase paralela a las caras de las celdas (SLIC). El principal problema de estos métodos era la eyección de estructuras espúreas (*jetsam, floatsam*) cuando la interfase no estaba lo suficientemente resuelta. Youngs [196] propone en sus trabajos aplicar una reconstrucción lineal en cada celda (*Pieceswise Linear Interface Capturing*, PLIC), empleando normales de interfase calculadas a partir del gradiente de la función color mediante esquemas de diferencias finitas. Este concepto logró reducir las eyecciones espúreas considerablemente, razón por la cual PLIC fue perfeccionada por varios autores y es hoy una de las técnicas más populares. Si bien se han desarrollado representaciones de orden superior [146], la reconstrucción lineal de la interfase presenta la ventaja de poder computarse de manera analítica en mallas cartesianas [154, 155].

A partir de la representación más precisa de la interfase, varios autores desarrollaron modelos para el cálculo de las fuerzas de tensión superficial, como el *Continuum*

Surface Force (CSF) [16] o el *Continuum Surface Stress* (CSS) [82]. Estos métodos requirieron una representación más precisa de la interfase, impulsando el desarrollo de cálculos por mínimos cuadrados (LVIRA y ELVIRA [137, 129]).

Si bien la formulación de VOF es inherentemente conservativa, los errores del esquema de advección pueden generar pérdidas de masa. El trabajo de Aulisa *et al.* [7] fue uno de los primeros casos en los que se logró conservación de masa con precisión de máquina. Más recientemente, Weymouth y Yue [190] desarrollaron un esquema conservativo de bajo costo computacional para mallas cartesianas.

Otra línea de desarrollo son los métodos VOF que evitan la reconstrucción de la interfase para su advección. Tal es el caso de CIP [166], THINC [192], y la combinación FCT-MULES [149, 188] que se encuentra implementada en el solver VOF de OpenFOAM[®], *interFoam*². Todos estos métodos evitan reconstruir la interfase aplicando esquemas algebraicos de advección con diferentes técnicas de compresión para mantener el carácter discontinuo de la interfase. Esta metodología sacrifica precisión en pos de reducir costos pero considerablemente menos costosa y, en el caso particular de *interFoam*, permite extender la técnica a mallas no estructuradas.

Por otra parte, algunos trabajos han presentado formulaciones VOF-PLIC en mallas no estructuradas [100, 115, 84]. El uso de algoritmos *unsplit* para la advección dota a estas implementaciones de conservación de masa con precisión de máquina. Sin embargo, la necesidad de generalizar la reconstrucción de interfase en poliedros y la complejidad de calcular intersecciones entre poliedros arbitrarios elevan el costo computacional. Una estrategia novedosa, implementada por Roenby y Jasak [147], estima la posición de la interfase empleando isosuperficies de la fracción de volumen. Si bien la representación es menos precisa que una formulación PLIC, su costo computacional es considerablemente menor y logra preservar la discontinuidad a lo largo de varias iteraciones.

En las secciones siguientes se describen las bases del método VOF en términos generales, dando especial énfasis a la implementación en Basilisk, empleada en las simulaciones de atomización de los capítulos 5 y 6.

²Para más detalle de la implementación de este método, consultar el apéndice B

4.5.1. Reconstrucción de interfase y advección geométrica en mallas cartesianas

La fracción de volumen empleada en VOF corresponde a la discretización por valor medio de una función Heaviside que determina la distribución de fases,

$$c(\mathbf{x}) \begin{cases} 1 & x \in V_1 \\ 0 & x \in V_2 \end{cases} \quad \tilde{c} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} c(\mathbf{x}) dV, \quad (4.58)$$

donde V_1 y V_2 son las regiones del dominio ocupadas por cada fase y el volumen Ω corresponde a una celda del FVM.

Luego, las Ecuaciones (3.18) de flujo bifásico, Newtoniano e incompresible pueden expresarse de manera discreta,

$$\frac{\tilde{c}^{n+\frac{1}{2}} - \tilde{c}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}^n \tilde{c}^n) = 0 \quad (4.59)$$

$$\rho^{n+\frac{1}{2}} \frac{\mathbf{u}^* - \mathbf{u}^n}{\Delta t} + \nabla \cdot [(\rho^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}}) \mathbf{u}^{n+\frac{1}{2}}] = \nabla \cdot [\mu^{n+\frac{1}{2}} (\mathbf{D}^n + \mathbf{D}^*)] + f_{\sigma}^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.60)$$

$$\nabla \cdot \left(\frac{\Delta t}{\rho^{n+\frac{1}{2}}} \nabla p^{n+\frac{1}{2}} \right) = \nabla \cdot (\mathbf{u}^*) \quad (4.61)$$

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* - \frac{\Delta t}{\rho^{n+\frac{1}{2}}} \nabla p^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.62)$$

El sistema debe resolverse en este orden, ya que la primera ecuación determina la distribución de fases a partir de la cual se calculan las propiedades $\rho^{n+\frac{1}{2}}$, $\mu^{n+\frac{1}{2}}$. Cabe notar aquí que el campo de velocidad se resuelve para tiempos enteros n mientras que el resto de los campos (\tilde{c} y p) se calculan para tiempos intermedios, a fin de utilizar diferencias centradas para la integración temporal.

Las últimas tres ecuaciones del sistema corresponden al FSM descrito en la Sección 4.3.2. El operador $\nabla \cdot$ simboliza una operación de divergencia discreta, que en el contexto de Volúmenes Finitos corresponde a,

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{u} dV = \sum_f \mathbf{u}_f \cdot \mathbf{S}_f \quad (4.63)$$

Así, sólo resta resolver la Ecuación (4.59), que en el contexto incompresible es equivalente a la Ecuación Topológica (3.15). Luego, la formulación conservativa en (4.59) permite obtener una expresión para actualizar la fracción de volumen,

$$\tilde{c}^{n+\frac{1}{2}} = \tilde{c}^{n-\frac{1}{2}} + \Delta t \sum_f F_f^{\tilde{c}}, \quad (4.64)$$

donde $F_f^{\tilde{c}}$ corresponde al flujo a través de cada cara, calculado a partir de la intersección entre el volumen total flujado a través de la cara y el espacio ocupado por la fase principal (Ω_1).

Por lo tanto, antes de calcular la evolución de \tilde{c} es necesario contar con la reconstrucción plana de la interfase en cada celda. Para ello, es necesario conocer la normal de la interfase,

$$\mathbf{n} = \frac{\nabla \tilde{c}}{|\nabla \tilde{c}|} \quad (4.65)$$

donde el cálculo del gradiente puede realizarse de diversas maneras. La implementación estándar empleada en Basilisk corresponde a la aproximación de Youngs [196], que consiste en promediar las normales calculadas en los vértices. Para una celda bidimensional,

$$\mathbf{n}_{i,j} = \frac{1}{4} \left(\mathbf{n}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} + \mathbf{n}_{i-\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} + \mathbf{n}_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} + \mathbf{n}_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} \right), \quad (4.66)$$

donde en cada uno de los vértices las normales se computan mediante aproximaciones de diferencias finitas. Para el vértice inferior izquierdo,

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_{i-\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}} = & \left(\frac{\tilde{c}_{i,j} + \tilde{c}_{i,j-1}}{2} - \frac{\tilde{c}_{i-1,j} + \tilde{c}_{i-1,j-1}}{2} \right) \hat{i} \\ & + \left(\frac{\tilde{c}_{i,j} + \tilde{c}_{i-1,j}}{2} - \frac{\tilde{c}_{i-1,j-1} + \tilde{c}_{i,j-1}}{2} \right) \hat{j} \end{aligned} \quad (4.67)$$

La extensión tridimensional de este método implicará promediar los ocho vértices de la celda hexaédrica, considerando para cada vértice las ocho celdas adyacentes al computar la normal [174, 4]. Finalmente, la ubicación del plano se define mediante el

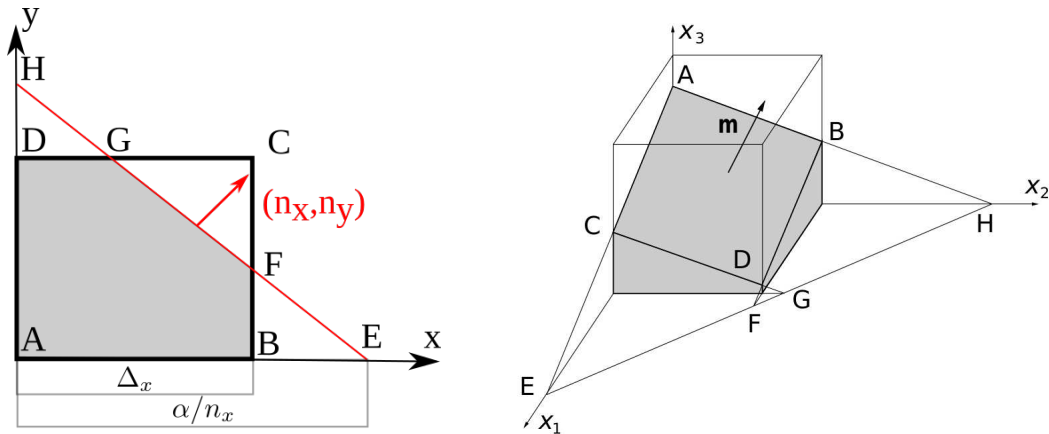


Figura 4.6: Definición de la reconstrucción en una celda 2D (izquierda) y 3D (derecha) [174].

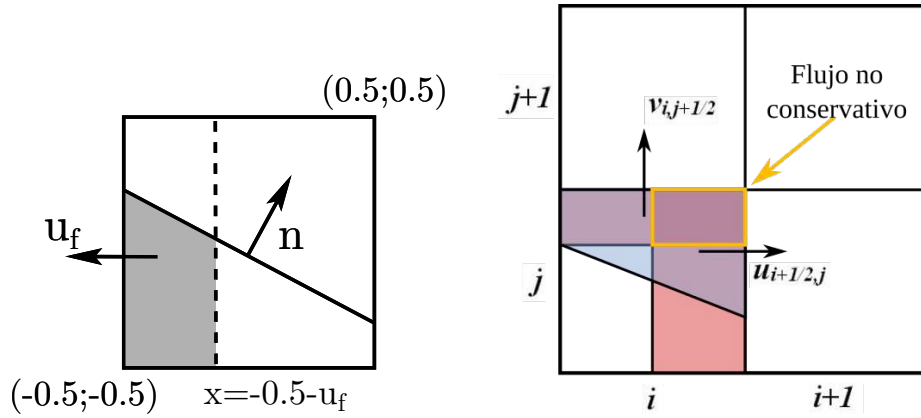


Figura 4.7: Flujo de VOF a través de la cara izquierda en una celda unitaria (izquierda), error por *splitting* direccional (derecha).

termino independiente de la ecuación lineal [154, 155, 4],

$$xn_x + yn_y = \alpha \quad (4.68)$$

donde el valor de α debe ser tal que la fase principal ocupe la fracción de volumen \tilde{c} en la celda. Para el caso 2D en el esquema 4.6, la región ocupada por la fase principal es,

$$\tilde{c} = \int_0^{\min(h, \alpha/n_x)} \min\left(h, \frac{\alpha}{n_y} - \frac{n_x}{n_y}x\right) dx \quad (4.69)$$

donde h es el lado de la celda, el paso de malla. Dependiendo de los valores relativos de n_x y n_y (y n_z en casos tridimensionales), Scardovelli y Zaleski [154] proponen un procedimiento para determinar la expresión analítica exacta de $\tilde{c}(\alpha)$ para una celda unitaria, escalando luego dicho valor por h .

De esta manera, la ubicación de los planos que reconstruyen la interfase en cada celda bidimensional se encuentra dada por,

$$V_1 = \frac{n_x}{2n_y} \quad \begin{cases} \alpha = \sqrt{2n_x n_y} \tilde{c} & 0 < \tilde{c} < V_1 \\ \alpha = n_y \tilde{c} + \frac{n_x}{2} & V_1 < \tilde{c} < 1/2 \end{cases} \quad (4.70)$$

donde el umbral V_1 considera que $n_x > n_y$. Las dos fórmulas anteriores pueden extenderse para todos los casos haciendo uso de simetrías y otras transformaciones.

La extensión tridimensional de las expresiones (4.70) involucra cinco fórmulas $\alpha(\tilde{c}, \mathbf{n})$ y tres límites de transición entre fórmulas, dados por las relaciones entre las componentes de \mathbf{n} .

Conocida la ubicación de la interfase, puede procederse a computar los flujos a través de la caras. Una manera de calcular los flujos es extruir las caras de cada celda aguas arriba una distancia $u_f \Delta t$, generando un *poliedro de flujo* y calcular luego su intersección con la ubicación de la fase a advectar. Este procedimiento se encuentra descripto gráficamente en la Figura 4.7, donde la forma analítica del flujo de VOF a través de la cara tiene la forma,

$$F_{i-\frac{1}{2}}^{\tilde{c}} = \int_{-0,5}^{-0,5+|u_f \Delta t|} \min \left(h, \frac{\alpha}{n_y} - \frac{n_x}{n_y} x \right) dx. \quad (4.71)$$

La expresión anterior asume diversas formas en función de la pendiente del plano interfase. En el caso de la figura, la expresión se reduce a $F_{i-\frac{1}{2}}^{\tilde{c}} = \left(\frac{\alpha}{n_y} - \frac{n_x}{n_y} \frac{|u_f \Delta t|}{2} \right) \frac{|u_f \Delta t|}{2}$

En esta metodología de integración, llamada *dimension-split*, los incrementos se calculan por dirección, actualizando la fracción de volumen cada vez. Es decir, para todas las celdas se calculan los flujos en el sentido x , se actualiza la representación de la interfase y se computan los flujos en el sentido y . Esta segregación de las direcciones de flujo puede conducir a la pérdida o ganancia de masa. Para resolver esta problemática, Weymouth y Yue desarrollaron una corrección que consiste en considerar un término dependiente de las derivadas parciales de velocidad y que en suma es proporcional a la divergencia en la celda [190]. Partiendo de la ecuación topológica escrita en términos de flujos conservativos,

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c\mathbf{u}) - c\nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0, \quad (4.72)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V c dV + \int_S (c\mathbf{u}) \cdot d\mathbf{S} - \int_V c \nabla \cdot (\mathbf{u}) dV = 0, \quad (4.73)$$

donde el último término integral no puede expresarse rigurosamente en términos de flujo porque la función de color c no es constante en las celdas mixtas. Sin embargo, Weymouth y Yue proponen utilizar una aproximación a través de una *función dilatación* c_c ,

$$\left(\frac{\tilde{c}^{n+\frac{1}{2}} - \tilde{c}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} \right) \Delta V + \sum_f (F^{\tilde{c}} - c_c \mathbf{u} \cdot \mathbf{S}_f) = 0 \quad (4.74)$$

$$c_c = \begin{cases} 1 & \tilde{c} > 0,5 \\ 0 & \tilde{c} \leq 0,5 \end{cases} \quad (4.75)$$

Luego, la Ecuación (4.74) permite calcular el incremento de la fracción de volumen mediante la siguiente fórmula,

$$\Delta_d F^{\tilde{c}} = F_{d+\frac{1}{2}}^{\tilde{c}} - F_{d-\frac{1}{2}}^{\tilde{c}} \quad (4.76)$$

$$\tilde{c}^{n+\frac{1}{2}} = \tilde{c}^{n-\frac{1}{2}} - \sum_{d=x,y,z} \frac{\Delta t}{\Delta V} \left[\Delta_d F^{\tilde{c}} - c_c \Delta_d (\mathbf{u}_n \cdot \mathbf{S})_f \right], \quad (4.77)$$

donde el operador Δ_d indica el flujo neto función \tilde{c} por la integración de flujos en las caras normales a la dirección d (x , y ó z).

El término de corrección al final de la Ecuación (4.77) considera un cálculo *split* de la divergencia en el caso de que la fracción principal llene más de la mitad de la celda. De esta manera, el esquema corrige los errores de superposición, como el que se ilustra en la Figura 4.7. Si el paso de tiempo se limita de forma que $\Delta t \sum \frac{u_x}{\Delta x} < 0,5$ y el campo de velocidades tiene divergencia nula (lo cual está garantizado por el FSM), este esquema de advección garantiza la conservación de masa con precisión de máquina [190].

4.5.2. Cálculo de curvatura para fuerzas de tensión superficial

En la Ecuación 4.60, el término fuente $f_\sigma^{n+\frac{1}{2}}$ corresponde al modelo de Brackbill para la tensión superficial [16, 133, 135], que puede resumirse en las siguientes aproximaciones:

$$f_\sigma^{n+\frac{1}{2}} = \sigma \kappa^{n+\frac{1}{2}} \mathbf{n}^{n+\frac{1}{2}} \quad (4.78)$$

$$\kappa^{n+\frac{1}{2}} \approx \nabla \cdot (\mathbf{n}) \quad \mathbf{n} = \frac{(\nabla \tilde{c})}{|(\nabla \tilde{c})|}. \quad (4.79)$$

Si bien la normal puede computarse por la aproximación de Youngs, κ requiere aproximaciones de mayor precisión, como el uso de funciones altura que será tratado en los párrafos siguientes

Las implementaciones originales de esta técnica eran susceptibles a sufrir corrientes parásitas debido a que el balance de presión y tensión superficial en su versión discreta no era exactamente nulo. Una solución a este inconveniente, propuesta por Renardy y Renardy [146] y por Francois *et. al.* [45], se obtiene al considerar la condición de equilibrio en su versión discreta,

$$-(\nabla p)^{n+\frac{1}{2}} + \sigma \kappa (\nabla \tilde{c})^{n+\frac{1}{2}} = 0, \quad (4.80)$$

si los operadores diferenciales discretos son consistentes y la curvatura κ se considera constante, al integrar la ecuación anterior se obtiene la condición de equilibrio, dada por la relación,

$$p^{n+\frac{1}{2}} = \sigma \kappa \tilde{c}^{n+\frac{1}{2}} + \text{cte.} \quad (4.81)$$

En el contexto de mallas colocadas, tanto la presión como la fracción de volumen se encuentran definidas en centro de celda. Así, basta emplear la misma discretización para los dos gradientes de la Ecuación (4.80). El gradiente de presión se computa en caras mediante diferencias centradas para garantizar el flujo solenoidal al final del FSM. De esta manera, la fuerza de tensión superficial debe sumarse en la predicción de velocidad inmediatamente antes de la corrección de presión:

$$u_f^{**} = u_f^* + \sigma \kappa_f^{n+\frac{1}{2}} \frac{\Delta t}{\rho_f} \left(\mathbf{n}_f^{n+\frac{1}{2}} \cdot \frac{\mathbf{S}_f}{|\mathbf{S}_f|} \right), \quad (4.82)$$

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{**} = \frac{u_i^* + u_{i+1}^*}{2} + \sigma \kappa_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \frac{\Delta t}{\rho_f} n_{x,i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}. \quad (4.83)$$

La última expresión corresponde a la cara ubicada en el punto $x = i + \frac{1}{2}$, entre las celdas de abscisa i e $i + 1$. Debido a que la malla es cartesiana y uniforme, el producto escalar de la Ecuación 4.82 será igual a la componente x de la normal a la interfase interpolada a la cara ($\mathbf{n}_f^{n+\frac{1}{2}}$).

Luego, en el centro de celda P se computa el valor de la fuerza a partir de la interpolación de los valores en cara, de la misma forma que el gradiente de presión,

$$u_{x,P}^{**} = u_{x,P}^* + \sigma \frac{\Delta t}{\rho_P} \left(\frac{\kappa_{i+1/2}^{n-\frac{1}{2}} n_{x,i-1/2}^{n+\frac{1}{2}} + \kappa_{i+1/2}^{n+\frac{1}{2}} n_{x,i+1/2}^{n+\frac{1}{2}}}{2} \right) \quad (4.84)$$

Esta formulación de la fuerza de tensión superficial es conservativa, cumpliendo con el balance discreto de momento en las caras[135]. Así, sólo resta definir un procedimiento de cálculo para la curvatura κ a fin de definir completamente el modelo CSF. La implementación de Basilisk utiliza funciones altura estimadas a partir de \tilde{c} con la misma formulación descrita en [133].

Cálculo de curvatura mediante funciones altura

Conocida una función $y = h(x)$, su curvatura puede computarse mediante la expresión,

$$\kappa_{2D} = \frac{h_{xx}}{[1 + h_x^2]^{3/2}} \quad \kappa_{3D} = \frac{h_{xx}(1 + h_y^2) + h_{yy}(1 + h_x^2) + 2h_{xy}h_xh_y}{[1 + h_x^2 + h_y^2]^{3/2}} \quad (4.85)$$

donde los subíndices en las funciones altura (HF) indican derivadas parciales de la función. Si bien las expresiones anteriores corresponden a funciones $y = h(x)$ y $z = h(x, y)$ (para casos 2D y 3D respectivamente) en la práctica se computa la distancia en la dimensión donde la componente de la normal a la interfase n sea mayor. Es decir, si la componente máxima es n_x , la función altura a emplear en 3D será $x = h(y, z)$

En el contexto de VOF-PLIC, las HF se construyen a partir de la posición de los planos que aproximan la interfase en un *stencil* centrado en la celda donde se desea computar la curvatura. Si se utiliza el cálculo directo dado en la Ecuación (4.85), basta un *stencil* 3×3 ($3 \times 3 \times 3$ en 3D) ya que la primera y segunda derivadas pueden computarse mediante fórmulas de diferencias finitas que emplean los valores en los primeros vecinos. También puede utilizarse una aproximación por ajuste de parábola basado en mínimos cuadrados; este algoritmo requiere el uso de un *stencil* 9×9 ($9 \times 9 \times 9$ en 3D).

En ambos casos, el proceso de cálculo de las HF, que se lleva a cabo para cada dirección cartesiana d , consiste en ubicar la interfase de cada columna (conjunto de celdas en la dirección d) y computar su distancia al marco de referencia en el *stencil* ($d = d_{min}$), tomando esa longitud como función altura. El proceso de construcción de la HF se encuentra descrito con mayor detalle en [133, 134].

4.5.3. Esquemas de advección *momentum-conserving*

Resuelta la distribución de fases en la Ecuación (4.59), es necesario integrar el balance de momento (4.60). En la formulación propuesta puede observarse que el término advectivo se encuentra expresado de forma conservativa. Esto no es casual, la transferencia de momento lineal entre fases es vital en los fenómenos de atomización, ya que define el desplazamiento y deformación de la interfase. Por lo tanto, emplear esquemas de advección que minimicen las transferencias espurias de momento es fundamental en simulaciones de atomización. A continuación se describen los lineamientos generales de un esquema *momentum-conserving*.

Análisis de esquemas de advección de momentum

La variable de flujo primitiva en las Ecuaciones (4.60) es la velocidad, considerada un campo suave. Por lo tanto, en el contexto de los algoritmos VOF geométricos, la discontinuidad en las celdas mixtas se transfiere también a densidad y viscosidad del fluido. Por lo tanto, el campo de momento $\mathbf{q} = \rho \mathbf{u}$ es también discontinuo y su flujo debe calcularse de forma consistente a los flujos másicos (ρ), que son a su vez función del flujo de \tilde{c} .

Una manera de lograr esta consistencia es calcular el flujo de momento en una cara como el producto del flujo de másico basado en VOF y una estimación de la velocidad en el poliedro de flujo correspondiente, como puede observarse en la Figura 4.8. De esta manera, los flujos de masa y momentum a través de la cara, F^p y F^q respectivamente, dependerán del flujo de VOF:

$$F^V = \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{u}_f \Delta t \quad F^p = \rho_1 F^{\tilde{c}} + \rho_2 (F^V - F^{\tilde{c}}) \quad F^q = \mathbf{u}_f F^p, \quad (4.86)$$

donde ρ_1 y ρ_2 son las densidades de cada fase, F^V es el volumen transferido a través de la cara f , cuyo vector normal área es \mathbf{S}_f y donde la velocidad tiene valor \mathbf{u}_f . El flujo de VOF ($F^{\tilde{c}}$) se define según la Ecuación (4.71). El valor \mathbf{u}_p corresponde a la estimación de velocidad en el poliedro de flujo. Esta metodología asegura la consistencia de los flujos con precisión de máquina, sin importar cuál sea el método para estimar \mathbf{u}_p . La aproximación más sencilla es emplear $\mathbf{u}_p = \mathbf{u}_P$, siendo P la celda donde se ubica el poliedro de flujo, que equivale a emplear los esquemas geométricos descriptos para VOF sobre el campo q de momento lineal.

El uso de estos esquemas es crítico en casos con relaciones de alta densidad, considerablemente más susceptibles a la transferencia numérica del momento entre fases [148]. A fin de evaluar los efectos de no utilizar esquemas de advección *momentum-conserving*, se analiza el siguiente caso de prueba.

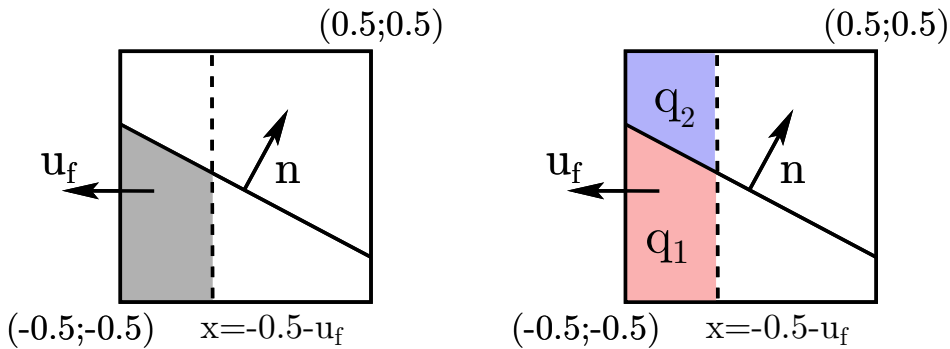


Figura 4.8: Flujo de momento consistente con el flujo másico de VOF

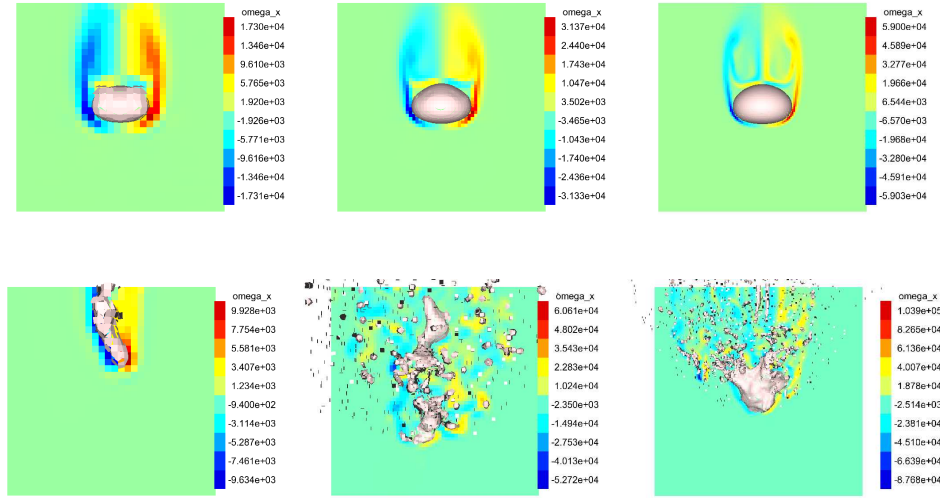


Figura 4.9: Gota suspendida en el instante $t = 0,4t_c$ empleando diversas resoluciones de malla (de izquierda a derecha: 8, 16 y 32 celdas por diámetro). Fila superior: esquemas *momentum-conserving*. Fila inferior: esquemas no *momentum-conserving*. Se representa la componente de vorticidad normal al plano de visualización

Una gota de agua de 3 mm, afectada por la gravedad de 9.8 m/s^2 (hacia abajo), se encuentra suspendida por un flujo de aire ascendente con una velocidad de 8 m/s. Los parámetros que definen este caso son:

$$\text{Re}_g = 1460 \quad \text{We}_g = 3,2 \quad \frac{\rho_l}{\rho_g} = 833 \quad \frac{\mu_l}{\mu_g} = 55 \quad t_c \approx 10 \text{ ms}$$

En este caso, el número de Weber está considerablemente por debajo del valor crítico ($\text{We} < 10$) y la gota no debe fragmentarse [54]. La Figura 4.9 muestra un estado de suspensión intermedio de la caída ($t = 0,4t_c$) resuelto con tres resoluciones de malla utilizando esquemas conservativos y no conservativos, equivalentes a los implementados en Gerris [133].

Los esquemas no conservativos producen gradientes de velocidad espurios cerca de la interfase. Si la malla es demasiado gruesa (por ejemplo, en el caso de 8 celdas por diámetro), el error numérico será relativamente uniforme alrededor de la gota, produciendo una deformación y un desplazamiento excesivos. A medida que el tamaño de la malla disminuye, las velocidades espurias presentan mayor variación espacial y producen fragmentación de la gota.

Por el contrario, los casos que utilizan el esquema conservativos reproducen el comportamiento físico esperado: la gota permanece coherente con todas las resoluciones de malla.

Estos resultados confirman la necesidad de utilizar la formulación *momentum-conserving* para problemas con alta relación de densidades. En simulaciones de atomización, donde el fenómeno de fragmentación es clave, el uso de esquemas no conservativos afectará significativamente el comportamiento de las gotas más pequeñas.

4.6. Modelos de turbulencia

Como fue descrito en la Sección 3.3, la turbulencia es un fenómeno inherente a la no linealidad en la Ecuación de Navier-Stokes y por lo tanto estará presente en cualquier flujo con un número de Reynolds lo suficientemente alto. En este contexto, podría pensarse que el carácter turbulento del flujo se encuentra correctamente representado si simplemente se resuelven las Ecuaciones de Medios Continuos aplicando un método numérico para discretizarlas y luego resolviendo el sistema algebraico resultante. Este procedimiento es conocido como Simulación Numérica Directa (DNS). Sin embargo, aplicar una discretización implica descomponer el dominio en celdas donde las variables de flujo asumen un único valor. Así, para representar las variaciones espaciales del flujo, la malla deberá estar compuesta de celdas cuya dimensión mínima que sea comparable a las estructuras de flujo que desean representarse en los resultados.

4.6.1. Resolución de las micro-escalas turbulentas

A medida que aumenta la energía cinética de un flujo turbulento, la gama de escalas espaciales y temporales se hace más amplia. La relación entre las escalas espaciales integrales y disipativas es proporcional a $Re^{3/4}$. A su vez, para representar la transferencia de energía entre todas las escalas del flujo a partir de las ecuaciones de Navier-Stokes es necesario que el paso de malla h sea comparable con la escala de Kolmogorov. Por lo tanto, si se considera una simulación tridimensional con malla uniforme, el costo computacional de representar todas las escalas turbulentas crecerá con orden $\mathcal{O}(Re^{9/4})$ [150].

De la Ecuación (3.34), la relación entre escalas del problema es igual a $Re^{-3/4}$. Por lo tanto, cantidad de celdas en una malla será proporcional a $Re^{2.25}$. La malla más fina reportada en la bibliografía para la simulación de atomización de chorros [159], emplea 6×10^9 celdas para resolver la inyección de un chorro con $Re_g = 8500$. El paso de malla en dicho caso es de $3,5 \times 10^{-7}$ m, mientras que la escala de Kolmogorov estimada mediante las relaciones (3.34), considerando el diámetro como escala integral, es de $\eta = 1,1 \times 10^{-7}$.

De esta manera, es posible estimar *a priori* la cantidad de elementos necesarios para llevar a cabo una simulación que resuelva todas las escalas de flujo, es decir, de forma tal que el espaciamiento de la discretización sea menor o igual a la escala de Kolmogorov.

4.6.2. Reducción del costo computacional

En este contexto, los modelos de turbulencia se han desarrollado a fin de reducir los grados de libertad del problema. Para lograrlo, se centran en resolver sólo algunas escalas de flujo y aplicar un modelo que represente los fenómenos energéticos en el resto del espectro.

Así, puede considerarse al modelo de turbulencia como un filtro, que descompone al campo de velocidades (y al resto de las variables) en una componente filtrada (la incógnita del sistema a resolver) y un residuo (el error debido a las escalas no representadas). Una primera gran clasificación bajo esta filosofía sería la siguiente:

Reynolds Average Navier-Stokes (RANS): Consiste en considerar el promedio estadístico de los campos, representando el flujo medio temporal para un período considerablemente largo. Debido a la pérdida del carácter transitorio del flujo, esta técnica no representa ninguna de las variaciones turbulentas del flujo, por lo tanto modela todas las escalas en el espectro de energía.

Large Eddy Simulation (LES): En este tipo de modelos, las ecuaciones de Navier-Stokes se resuelven considerando como incógnita a un campo de velocidad afectado por un operador que filtra todos los números de onda por debajo de cierto valor. Es decir, se consideran sólo las escalas de flujo cuya longitud característica sea superior a la del filtro, las escalas reducidas se acumulan en el campo residuo a modelar.

4.6.3. Separación de escalas

Avanzando sobre el concepto anterior, puede realizarse la siguiente descomposición de los campos

$$f = \bar{f} + f' \quad (4.87)$$

donde $\bar{f} = \mathcal{F}(f)$ es la componente *filtrada* o resuelta del campo. Aplicando esta definición para la velocidad en las ecuaciones de Navier-Stokes y trabajando algebraicamente cada término puede obtenerse un nuevo sistema de ecuaciones donde la incógnita sea el campo de velocidad filtrado, $\bar{\mathbf{u}}$. Esto requiere conmutar el filtro con

los operadores en las ecuaciones, para lo cual es necesario tener en cuenta el error de conmutación entre operadores a y b ,

$$[a, b] = a \circ b(f) - b \circ a(f) \quad (4.88)$$

Para el caso particular de flujo incompresible-Newtoniano, el sistema resultante es,

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = -A_1 \quad (4.89)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{\mathbf{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathcal{B}(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{u}})) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{g} + A_2 + A_3 + A_4 \quad (4.90)$$

donde A_1, A_2, A_3 y A_4 son operadores compuestos que resultan de conmutar la aplicación del filtro y los operadores diferenciales [150]. El producto diádico en el término no lineal ha sido notado explícitamente como $\mathcal{B}(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{u}})$, para hacer resaltar su aplicación como operador. De esta manera,

$$A_1 = [\mathcal{F}, \nabla \cdot] \mathbf{u} \quad (4.91)$$

$$A_2 = \nabla \cdot [\mathcal{F}, \mathcal{B}](\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{u}}) \quad (4.92)$$

$$A_3 = [\mathcal{F}, \nabla \cdot] \mathcal{B}(\bar{\mathbf{u}}, \bar{\mathbf{u}}) + [\mathcal{F}, \nabla] p + \nu [\mathcal{F}, \nabla^2] \mathbf{u} \quad (4.93)$$

$$A_4 = [\mathcal{F}, \frac{\partial}{\partial t}] \mathbf{u}. \quad (4.94)$$

El término A_2 involucra el operador no lineal de las Ecuaciones de Navier-Stokes y por lo tanto siempre afectará al sistema. El resto de los residuos se presentarán sólo en el caso de que el filtro \mathcal{F} desacople las derivadas temporales o espaciales de la escala resuelta.

RANS

El filtro aplicado para RANS considera como componente resuelta el promediado de ensamble, lo que resulta en,

$$\bar{f} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f \quad (4.95)$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0 \quad (4.96)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{\mathbf{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{g} - \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_{RANS}) \quad (4.97)$$

$$\boldsymbol{\tau}_{RANS} = \overline{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'}. \quad (4.98)$$

Debido a que el residuo no es conocido, el tensor de esfuerzos Reynolds τ_{RANS} se calcula mediante diversos modelos. Si bien la formulación RANS es popular por reducir el costo significativamente, modela todos los fenómenos de transferencia en toda la gama de escalas del espectro de energía y por lo tanto no es apto para la simulación de fenómenos transitorios dominados por turbulencia.

LES

Esta técnica se basa en la descomposición de escalas de flujo empleando un filtro de integración espacial con un *kernel* $G(\mathbf{x})$ que tiene asociada una determinada longitud característica Δ . De esta manera,

$$\bar{f} = \frac{1}{V} \int_V G(\mathbf{x}) f dV \quad (4.99)$$

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{u}} = 0 \quad (4.100)$$

$$\frac{\partial(\rho \bar{\mathbf{u}})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}}) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \bar{\mathbf{u}} + \rho \mathbf{g} - \nabla \cdot (\tau_{SGS}) \quad (4.101)$$

$$\tau_{SGS} = \underbrace{[\bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}} - (\bar{\mathbf{u}} \otimes \bar{\mathbf{u}})]}_L + \underbrace{[\mathbf{u}' \otimes \bar{\mathbf{u}} + \bar{\mathbf{u}} \otimes \mathbf{u}']}_C + \underbrace{\mathbf{u}' \otimes \mathbf{u}'}_R. \quad (4.102)$$

Donde las tres componentes del tensor subgrilla τ_{SGS} , separadas mediante llaves, son:

- El tensor de esfuerzos de *Leonard* (L), caracteriza la transferencia de energía dentro de las escalas resueltas. Como sólo depende de $\bar{\mathbf{u}}$ puede estimarse a partir de la componente resuelta.
- El tensor esfuerzos *Cross* (C), determina la interacción entre las escalas resueltas y no resueltas.
- El tensor de esfuerzos de *Reynolds* (R), determina el efecto de las escalas no resueltas sobre el flujo resuelto.

En este contexto, cabe notar que la discretización planteada en FVM es, de hecho, un filtro (como el definido en la Ecuación (4.99) tipo "caja" de cada variable,

$$\bar{f} = \frac{1}{V_\Omega} \int_\Omega G_\Omega f d\Omega \quad G(\mathbf{x}) \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \Omega \\ 0 & \mathbf{x} \notin \Omega \end{cases} \quad (4.103)$$

donde Ω es una celda genérica de la malla.

En el contexto del Método de Volúmenes Finitos, la componente resuelta corresponde al valor medio en cada celda. De esta manera, el paso de malla se convierte en la

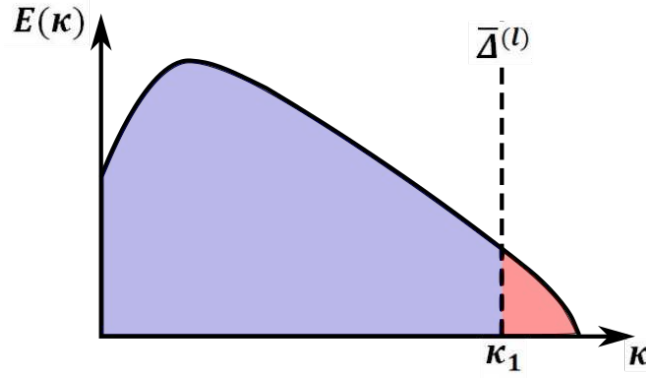


Figura 4.10: Separación de escalas resueltas (azul) y modeladas (rojo) para LES. Adaptación de [150].

longitud característica del filtro ($\Delta_G = h$), que elimina todas las frecuencias superiores a π/h . Es decir, se pierden todas las variaciones del campo dentro de la celda.

Por otra parte, el cálculo de τ_{SGS} suele involucrar expresiones del tensor deformación que resultan en un término difusivo adicional. Por ejemplo, el modelo de Smagorinsky-Lily posee la siguiente formulación,

$$\tau_{SGS} = -2 \left[(C_s h)^2 |\bar{\mathbf{D}}| \right] \bar{\mathbf{D}} \rightarrow \nu_{SGS} = (C_s h)^2 |\bar{\mathbf{D}}| \quad (4.104)$$

donde $\bar{\mathbf{D}}$ es el tensor simétrico de deformación calculado a partir de la componente resuelta. Esta formulación supone un estado de turbulencia homogénea y considera que el transporte generado por las escalas no resueltas es equivalente a un efecto puramente difusivo. A partir de esta idea, se han desarrollado otros modelos de cierre dinámicos que contemplan condiciones de flujo más complejas [50, 91, 184].

Sin embargo, se ha reportado que estos modelos son excesivamente difusivos. Boris *et. al.* [15] sugieren realizar simulaciones LES sin aplicar modelos de cierre subgrilla, considerando que el error difusivo de los esquemas de advección era superior al necesario.

Esta metodología, conocida actualmente como Implicit LES o ILES, ha ganado popularidad debido a que no requiere esfuerzos adicionales en su implementación y reduce la cantidad de variables a ajustar en el modelo [164, 17]. La única variable de ajuste en el modelo ILES es el filtro G , que en el caso de FVM se encuentra definido por la malla.

4.7. Refinamiento de malla adaptativo

Como se analizó en el capítulo 2, la formación de aerosoles tiene diversas escalas espaciales y temporales que deben ser representadas en la simulación a fin de replicar el comportamiento físico del flujo.

A priori, en un problema de atomización general, lo anterior implica representar correctamente todas las gotas desprendidas. En contextos de altos números de Reynolds y Weber las gotas de menor tamaño pueden diferir de la escala integral del problema en varios órdenes de magnitud. Sin embargo, existen regiones del flujo donde los requerimientos de resolución no son tan exigentes. Es decir, debido al fuerte carácter local de la turbulencia y la dispersión de gotas en zonas acotadas del espacio, el paso de malla requerido para alcanzar una resolución de flujo aceptable no es uniforme.

Una solución ampliamente empleada en este tipo de problemas es el uso de Refinamiento Adaptativo de Malla (AMR). Existen diversas maneras de aplicar estrategias de refinamiento adaptativo, en la secciones siguientes se describe la metodología implementada en Basilisk.

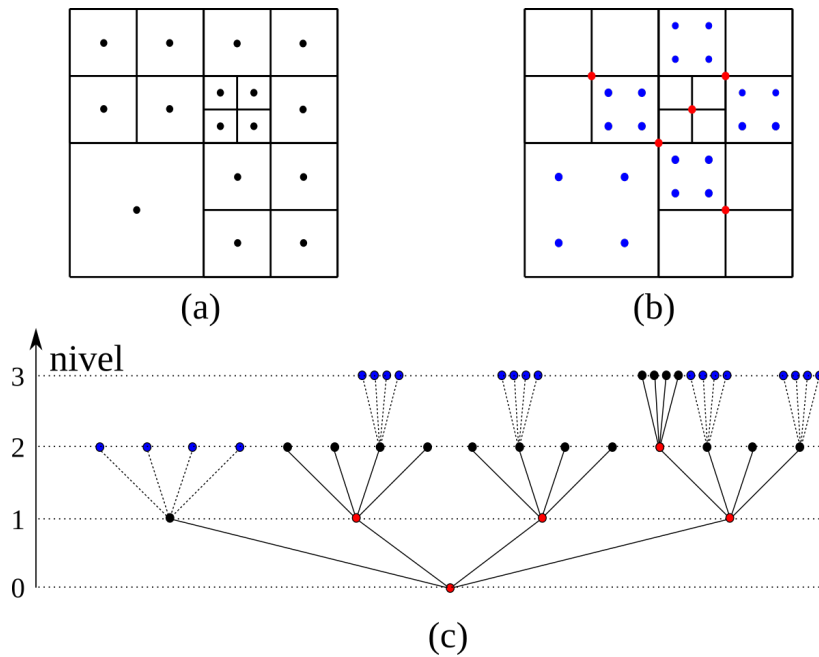


Figura 4.11: Esquema de celdas en malla *quadtree*. Nodos activos (a), restricciones y prolongaciones (b) en rojo y azul respectivamente. Representación en forma de árbol (c).

4.7.1. Mallas tipo *tree*

A fin de facilitar la explicación siguiente, se presenta el esquema de la Figura 4.11 que consiste en un caso simple de malla bi-dimensional *quadtree*.

En Basilisk, toda malla adaptativa comienza como un elemento de lado L . Dicho dominio es la celda raíz o madre. *Aplicar un nivel de refinamiento* significa subdividir esa celda a la mitad en cada una de sus dimensiones. Es decir, en un caso 2D la celda es un cuadrado y se divide en 4 cuadrados de lado $L/2$ (de allí el nombre *quadtree*); en 3D la celda es un cubo que se divide en 8 cubos de lado $L/2$ (*octree*). La celda dividida es la madre de las nuevas celdas. Toda celda que no se encuentre subdividida es un nodo activo, es decir, una celda funcional, también llamada una *celda hoja* (representada en el esquema con puntos negros). Tanto las celdas madres como el halo se calculan en el momento que sean necesarios, es decir, no son grados de libertad del problema.

La ventaja del AMR es su capacidad de reducir el costo computacional aplicando el refinamiento sólo donde es requerido. Para lograrlo, cada celda puede dividirse de manera independiente. Antes de avanzar sobre el criterio de refinamiento, cabe aclarar cómo se opera en las caras entre 2 niveles de refinamiento diferentes.

Como se analizó en el Capítulo 4, el Método de Volúmenes Finitos permite calcular la evolución de valores en celda a partir de las ecuaciones algebraicas que se obtienen mediante los operadores de discretización. Los flujos entre celdas se calculan interpolando en las caras los valores en centro de celda. Estas aproximaciones pierden precisión cuando la línea entre centro de celdas no es normal a las caras o no cruza la cara por su centroide.

A fin de evitar estos inconvenientes, las implementaciones *tree* cuentan con nodos *artificiales* llamados *prolongaciones* o *restricciones*, representados en la Figura 4.11 mediante puntos azules y rojos respectivamente. El conjunto de todos estos nodos se

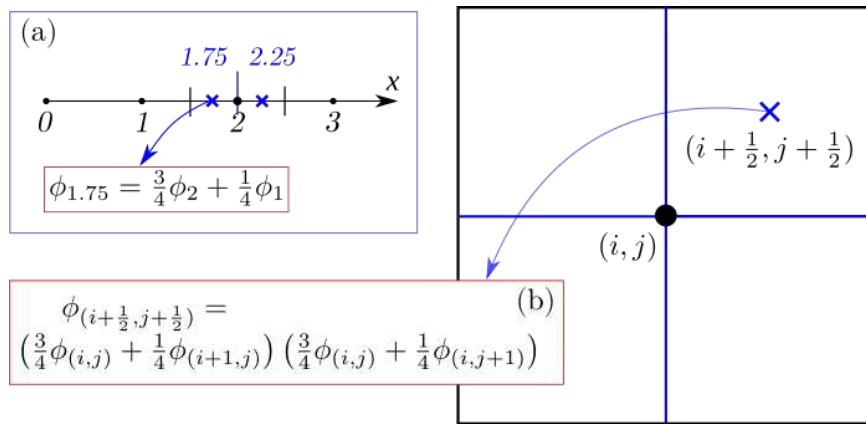


Figura 4.12: Ejemplo de interpolación bi-lineal en malla *quadtree*. Fórmula 1D (a), extensión al caso bidimensional(b).

llama *halo*.

$$\phi_p = \sum_{i=m,nb} a_i \phi_i \quad (4.105)$$

$$\phi_r = \frac{1}{N_c} \sum_{c=0,2^{dim}-1} \phi_c \quad (4.106)$$

Las prolongaciones (ϕ_p) son valores interpolados en la ubicación donde se encontraría la celda refinada. El esquema de interpolación bilineal es el estándar para campos suaves, implementado utilizando un *stencil* de diferencias finitas, expresado en la Ecuación (4.105) en términos de los vecinos (nb) de la celda madre m (inclusive) y los coeficientes de interpolación (a_i), que guardan siempre la misma relación con h debido a que la malla es cartesiana. Para campos suaves, el error de la aproximación bilineal es $\mathcal{O}(h)$. La restricción (ϕ_r), en cambio, se calcula usualmente como el promedio de las celdas hijas (ϕ_c) [179, 186].

Para la fracción de volumen \tilde{c} , la prolongación se calcula como la intersección entre la celda hija y la región llena de la celda madre, utilizando los mismos operadores geométricos que se aplican para el cálculo de flujos [154, 155].

De esta manera, para cada cara se dispone de valores en los dos nodos adyacentes, ya sea en celdas hoja o en el halo, teniendo una distribución de datos equivalente a un problema de mallas cartesianas. Así, se eliminan errores de *skewness* y *no ortogonalidad*, preservando el orden de precisión de los esquemas de advección. Esto constituye una ventaja significativa de Basilisk frente a software que utilice mallas *body fitted* (OpenFOAM[®], por ejemplo). Cabe aclarar que el uso de valores interpolados introduce un error difusivo localizado en la frontera entre niveles de refinamiento, pero esto no genera inestabilidad del método numérico ni resultados no físicos.

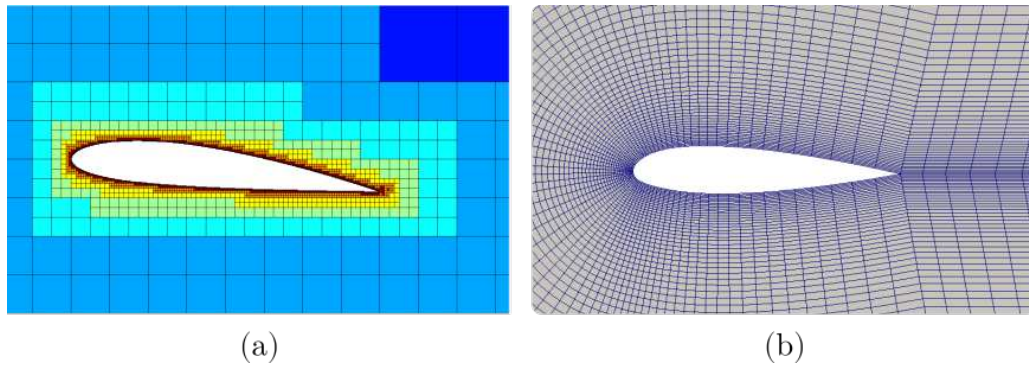


Figura 4.13: Mallas para perfiles NACA: *staircase* en Gerris, coloreada por nivel de refinamiento (a) y *body-fitted* en OpenFOAM[®], no estructurada con refinamiento en capa límite (b).

Por otra parte, la representación de geometrías complejas en Basilisk se realiza con mallas *staircase*³, reduciendo la precisión en las condiciones de contorno que no estén alineadas con la malla. En este tipo de problemas, una formulación de mallas arbitrarias como la de OpenFOAM® será más efectiva, permitiendo un mallado *body-fitted*, es decir, ajustado a la geometría. La Figura 4.13 muestra ejemplos de estas estrategias de mallado en perfiles aerodinámicos simples.

4.7.2. Estrategias de refinamiento

La filosofía original de Basilisk es emplear AMR para acotar el error de interpolación de un campo hasta alcanzar un nivel de precisión preestablecido. Como indicador de este error numérico, se considera una aproximación basada en *wavelets*. Un *wavelets* $\Psi(\mathbf{x})$ es una función L2-integrable que tiene soporte compacto tanto en el dominio espacial como en el espectral [156]. Un conjunto ortonormal completo de *wavelets* es un espacio de Hilbert, que puede emplearse como base para expresar cualquier función $\phi(\mathbf{x})$ suave,

$$\phi(\mathbf{x}) = \sum_{i \in \mathcal{I}_{\Phi}^0} \phi_i^0 \Phi_i^0(\mathbf{x}) + \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{\mu=1}^{2^d-1} \sum_{i \in \mathcal{I}_{\Psi}^{\mu,j}} \phi_i^{\mu,j} \Psi_i^{\mu,j}(\mathbf{x}) \quad (4.107)$$

donde ϕ_i^0 y $\Phi_i^0(\mathbf{x})$ son los coeficientes y funciones de escala para el menor nivel de refinamiento, es decir, que actúan en todo el dominio. La descomposición de las variaciones está dada por los coeficientes $u_i^{\mu,j}$ y wavelets $\Psi_i^{\mu,j}(\mathbf{x})$, nivel de resolución j , que define el tamaño del soporte, y familias μ , que determinan ubicación del soporte,

$$\Psi_i^{\mu,j}(\mathbf{x}) = 2^{\frac{j}{2}} \Psi_i(2^j \mathbf{x} - \mu). \quad (4.108)$$

A partir de este marco teórico, puede considerarse que la versión discreta de la función solución corresponde al truncamiento de la serie en la Ecuación 4.107 hasta un nivel de resolución finito l ,

$$\phi^l(\mathbf{x}) = \sum_{i \in \mathcal{I}_{\Phi}^0} \phi_i^0 \Phi_i^0(\mathbf{x}) + \sum_{j=0}^l \sum_{\mu=1}^{2^d-1} \sum_{i \in \mathcal{I}_{\Psi}^{\mu,j}} \phi_i^{\mu,j} \Psi_i^{\mu,j}(\mathbf{x}). \quad (4.109)$$

³A fines del 2018, se publicó en Basilisk una formulación de *embed boundary* para representar sólidos con segundo orden de precisión. No obstante, el mallado de OpenFOAM® sigue siendo considerablemente más flexible.

Luego, si se comparan una discretización dada $u^l(\mathbf{x})$ con su truncamiento al nivel superior $u^{l-1}(\mathbf{x})$,

$$\phi^l(\mathbf{x}) - \phi^{l-1}(\mathbf{x}) = \sum_{\mu=1}^{2^d-1} \sum_{i \in \mathcal{J}_{\Psi}^{\mu,j}} \phi_i^{\mu,j} \Psi_i^{\mu,j}(\mathbf{x}), \quad (4.110)$$

se obtiene la función residuo, cuyo valor puede emplearse como indicador del error local de la discretización. Más aún, dado que no existe superposición del soporte en l , el valor absoluto de la función residuo en un punto \mathbf{x}_p corresponderá al valor de un único wavelet

$$e(\mathbf{x}_p) \approx |\phi^l - \phi^{l-1}|(\mathbf{x}_p) = \max |u_i^{\mu,j} \Psi_i^{\mu,j}(\mathbf{x}_p)|. \quad (4.111)$$

Se observa entonces que la diferencia entre aproximaciones con niveles sucesivos de refinamiento es una medida del error de discretización local. Así, el valor de error estimado en una celda P , en la implementación utilizada, es la máxima diferencia entre el valor de celda y sus prolongaciones. Así se define la función error basado wavelet discreta,

$$w(\phi_P) = \max |\phi_c - \phi_P|. \quad (4.112)$$

De acuerdo a la Ecuación (4.111), este indicador es una norma del wavelet en esa ubicación; este procedimiento es también equivalente, debido a las interpolaciones empleadas, a evaluar una aproximación discreta de la norma del Hessiano [116, 179].

El criterio de refinamiento queda totalmente definido al fijar una banda de error tolerado. En Basilisk, esta banda se define sólo por el valor máximo (e_{max}), fijando el valor inferior de la banda como $e_{min} = \frac{2}{3}e_{max}$. De esta manera, considerando la definición de prolongaciones (4.105),

$$w(\phi_P) = \max |\phi_c - \phi_P| \begin{cases} w(\phi_P) > e_{max} \rightarrow \text{refinar} \\ w(\phi_P) < e_{min} \rightarrow \text{desrefinar} \end{cases} \quad (4.113)$$

Cabe aclarar que esta interpretación es válida sólo para las variables primitivas, es decir, para campos descritos mediante valores almacenados en centro de celda. En el caso de Navier-Stokes bifásico, estas variables son la fracción de volumen (\tilde{c}) y las componentes de velocidad (\mathbf{u}). Si bien podría aplicarse el mismo procedimiento a variables de cálculo indirecto, por ejemplo la vorticidad, esto no sería formalmente correcto ya que estas variables se computan a partir de operadores diferenciales que introducen un nuevo tipo de error numérico; por ende, la expresión (4.111) pierde validez. Bajo el mismo concepto, el campo de presión p se emplea en el FSM como corrección numérica, perdiendo su carácter de variable primitiva discretizada.

La estrategia de refinamiento por wavelets se basa en limitar el error numérico y por lo tanto es aplicable independientemente del problema a resolver. Si se desea preservar cierta propiedad física del campo \mathbf{u} , es necesario extender el algoritmo para aplicando un nuevo criterio. La transferencia de energía entre las escalas turbulentas del flujo, por ejemplo, no se encuentra garantizada por el refinamiento basado en wavelets.

A fin de utilizar el entorno AMR de Basilisk para aplicar un modelo de turbulencia LES, se ha implementado una estrategia de refinamiento basada en el valor de una función indicador definida como el cociente de la longitud característica del filtro, Δ_G y la escala de Kolomogorov local estimada. En resumen,

$$K(\mathbf{u}) = \frac{\Delta_G}{\eta} \quad \eta = \left(\frac{v^3}{\varepsilon} \right)^{1/4} \quad \varepsilon = v(\mathbf{D} : \mathbf{D}) \quad (4.114)$$

En el contexto de ILES, el paso de malla es la longitud característica del filtro ($h_P = \Delta_G$). A su vez, en la representación discreta el tensor deformación \mathbf{D} se calcula mediante diferencias centradas de \mathbf{u} para la celda P considerando sólo primeros vecinos. Así,

$$K_P = \frac{h_P}{\sqrt{v_P/|\mathbf{D}_P|}} \rightarrow K_P = \frac{h_P}{\sqrt{v_P}} \sqrt{|\mathbf{D}_P|} \quad (4.115)$$

El uso de AMR permite aplicar un filtro adaptativo, de manera que pueda ajustarse el *kernel* en función de las escalas disipativas locales, manteniendo en todo el dominio la misma proporción $\Delta_r = \Delta_G/\eta$. Definiendo a priori Δ_r se seleccionan las escalas turbulentas a simular como múltiplos de la escala disipativa. Más aún, puede restringirse el umbral para resolver todas las escalas de turbulencia; de acuerdo a Pope [131], puede considerarse que una simulación DNS resuelve completamente todas las escalas de turbulencia si $\Delta_r \leq 2,1$. De forma general, puede definirse una banda de resolución,

$$K_P = h_P \sqrt{\frac{|\mathbf{D}_P|}{v_P}} \begin{cases} K_P > \Delta_r^{max} \rightarrow \text{refinar} \\ K_P < \Delta_r^{min} \rightarrow \text{desrefinar} \end{cases} \quad (4.116)$$

Cabe notar que la escala de Kolmogorov local η se estima con derivadas de \mathbf{u} utilizando aproximaciones lineales de segundo orden que introducen un error numérico. Por lo tanto, la práctica más segura es emplear ambos criterios de refinamiento en conjunto: limitar el error numérico en \mathbf{u} , mediante el refinamiento en (4.113), y mantener la función K en el rango prescripto en en (4.116) para garantizar la proporción entre el filtro de malla y las escalas turbulentas más reducidas.

4.8. Sumario: Algoritmo VOF-PLIC con AMR-ILES

Todas las simulaciones VOF de atomización realizadas en esta tesis se llevaron a cabo con el algoritmo 1 que tiene las siguientes características,

- Utiliza FVM en malla colocada cartesiana, con discretizaciones de segundo orden en tiempo (Crank-Nicolson) y en espacio (diferencias centradas y BCG).
- Aplica el método de la proyección aproximada para resolver el acoplamiento presión-velocidad.
- Aplica esquemas de advección *momentum-conserving*.
- Utiliza AMR en malla *octree*, acotando el error numérico de \tilde{c} y \mathbf{u} y ajustando el filtro ILES para mantener una relación h/η fija.

Respecto al modelado de las fuerzas de interfase:

- La fuerza de tensión superficial se calcula de acuerdo al modelo CSF de Brackbill [16], computando la curvatura por ajuste parabólico de funciones altura [174]
- Los términos de aceleración por gradiente de presión y fuerza de tensión superficial se calculan con esquemas centrados en las caras, garantizando un balance de las fuerzas discretas con precisión de máquina [135].

Algorithm 1: Implementación de VOF geométrico en Basilisk

1. Advección de la función VOF c y actualización de las propiedades

$$c^{n+1/2} \rightarrow (\rho^{n+1/2}, \mu^{n+1/2}, \kappa^{n+1/2}) \quad \mathbf{a}^{n+1/2} = \mathbf{g} + \sigma \kappa^{n+1/2} \quad F_f^q = u_f^{n+1/2} F_f^p$$

2. Suma de los términos advectivos a la predicción de velocidad (*explicito*):

$$q_d^p = q_d^n - \frac{\Delta t}{\Delta V} \sum F_d^q \rightarrow \mathbf{u}^p = \frac{\mathbf{q}^p}{\rho^{n+1/2}}$$

3. Suma de los flujos difusivos a la predicción (*semi-implicito*):

$$\sum_f \mathbf{D}^f(\mu^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}^*) \cdot \mathbf{S}_f + \frac{\rho^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta V} \mathbf{u}^* = \sum_f \mathbf{D}^f(\mu^{n+\frac{1}{2}}, \mathbf{u}^p) \cdot \mathbf{S}_f$$

4. Resolución de la ecuación de Poisson para la presión.

$$\sum_f \left(\frac{\Delta t}{\rho^{n+\frac{1}{2}}} \nabla p^{n+\frac{1}{2}} \right) \cdot \mathbf{S}_f = \sum_f (\mathbf{u}_f^* + \mathbf{a}^{n+\frac{1}{2}} \Delta t) \cdot \mathbf{S}_f$$

5. Corrección de velocidad en centro de celdas.

$$\mathbf{u}^{n+1} = \mathbf{u}^* + \mathbf{a}^{n+\frac{1}{2}} \Delta t - \frac{\Delta t}{\rho^{n+\frac{1}{2}}} \nabla p^{n+\frac{1}{2}}$$

Capítulo 5

Atomización Primaria

Como se describe en el Capítulo 2, la atomización primaria desarrollada en los primeros instantes de inyección es un proceso dominado por fenómenos inerciales. El estudio de la turbulencia en el Capítulo 3 muestra que estos regímenes de flujo, con altos números de Reynolds, presentan un amplio rango de escalas temporales y espaciales. A su vez, la existencia de una interfase requiere extender la Mecánica de Continuo tradicional agregando complejidad al modelo. A fin de representar el problema numéricamente, en el Capítulo 4 se describen no sólo las bases teóricas de las técnicas empleadas sino también la implementación de herramientas que permiten reducir el costo computacional del problema manteniendo el nivel de precisión requerido para un estudio detallado del fenómeno.

En este contexto, el capítulo siguiente presenta problemas académicos de atomización de chorros cilíndricos en un dominio de gas estanco, empleando condiciones similares a un proceso de inyección diesel, a velocidades moderadas [105, 151]. En todos los casos se utiliza el Algoritmo (1), implementado en Basilisk utilizando estrategias de refinamiento para acotar el error numérico y regular el filtro espacial del modelo ILES implementado.

De manera preliminar, se establecen las relaciones de dependencia entre los parámetros de un problema de inyección típico y las escalas de flujo. Luego se utilizan estas expresiones para estimar *a priori* el costo computacional de aplicar DNS en un problema de atomización.

Esta primera instancia de simulación tiene como principal objetivo caracterizar el fenómeno en términos generales, analizando los efectos de la variación en los parámetros físicos, en particular del número de Weber. Asimismo, se presenta un análisis del efecto de la condición de contorno y del paso de malla, cuantificando el nivel de error en la solución.

Para cada caso de estudio, se caracterizan las nubes de gotas desarrolladas mediante análisis estadístico del tamaño, posición y velocidad de gotas, considerando también la evolución temporal de estas propiedades en diferentes regiones del aerosol.

5.1. DNS de atomización primaria: estado del arte

Caracterizar la atomización en un chorro combustible mediante Simulación Numérica Directa es, al día de hoy, un problema abierto. Esto se debe al alto costo computacional derivado del carácter multiescala del fenómeno [22] y a la dificultad de obtener datos experimentales detallados de los procesos de atomización primaria [36] que puedan emplearse en el proceso de validación.

Algunos de los estudios numéricos más relevantes desarrollados en este tópico se listan a continuación:

- Berlemont, Ménard y colaboradores [105] simularon un chorro diesel a velocidades moderadas (100 m/s), aplicando técnicas avanzadas de representación de interfase (CLSVOF) y una condición de contorno turbulenta [79]. A partir de los resultados obtenidos, desarrollaron estudios para inferir el efecto de los fenómenos en las escalas sub-grilla [22] y propusieron modelos algebraicos para los fenómenos de interfase en el contexto de una formulación ELSA (*Eulerian Lagrangian Spray Atomization* [85, 3]).
- Desjardins y Pitsch [32], utilizando Level-Set y Ghost Fluid Method, analizaron la atomización de un chorro plano (de sección rectangular) en un dominio periódico para diversos regímenes de flujo, variando los números de Weber y Reynolds del problema. En dicho análisis observaron la relación entre el desarrollo de la turbulencia y las inestabilidades hidrodinámicas en la superficie del chorro.
- Shinjo y Umemura [159] trabajaron con simulaciones Level-Set de problemas académicos a menores valores de Re y We . Estas configuraciones presentan la ventaja de tener longitudes características mayores, lo que implica un menor costo para alcanzar una resolución completa del espectro de turbulencia mediante DNS. Este análisis presenta un amplio estudio de la topología en la punta del chorro y los procesos de generación de vórtices. Si bien las condiciones de contorno empleadas no representan el flujo interno del inyector correctamente, estas simulaciones logran capturar con gran detalle el crecimiento de inestabilidades hidrodinámicas en la punta del chorro.

- Sirignano *et. al.* [72, 73, 198]: analizaron las estructuras formadas en la deformación de chorros cilíndricos y rectangulares periódicos para diferentes combinaciones de Re , Z , ρ^* , μ^* . Estos trabajos describen la dinámica de vórtices en las inestabilidades desarrolladas a lo largo del núcleo del chorro, analizando la interacción entre la turbulencia y los mecanismos de fragmentación.
- Ling *et. al.* [94, 200]: utilizando Basilisk, han realizado simulaciones de chorros diesel (y biodiesel) en diversas condiciones de inyección a velocidades moderadas. Mediante una completa caracterización estadística de los casos, Ling analiza la evolución global del aerosol. Asimismo, dicho trabajo presenta un estudio de convergencia en malla. Estas simulaciones son las más similares a las presentadas en este capítulo. Como puntos de mejora, en esta tesis se utilizaron esquemas de advección conservativos, paso de malla más reducido y nuevas condiciones de contorno basadas en la representación de la turbulencia dentro del inyector.
- El *spray A* [151] es un caso *benchmark* estudiado tanto numérica como experimentalmente por la Red de Motores de Combustión (ECN) [41]. Si bien la base de datos experimentales cuenta con una descripción detallada de la región dispersa del *spray*, no existen mediciones de las propiedades en la zona densa debido a la dificultad de analizar regiones tan reducidas con la frecuencia de muestreo y la precisión requerida. Por otra parte, las simulaciones numéricas realizadas sobre este caso se basan en una configuración a velocidad moderada, a fin de poder emplear un paso de malla más grueso y reducir el costo del problema.

Todas estas líneas de investigación pueden ser consideradas el estándar actual del DNS aplicado a inyección de combustible en motores.

La atomización primaria ha sido también estudiada para problemas con otras geometrías, como lámina planas [136] y atomizadores coaxiales [47]. Además de estar presentes en los inyectores para turbinas de avión, la fragmentación de láminas por perforación y expansión de las perforaciones es un fenómeno presente en la gran mayoría de problemas de atomización.

Por otra parte, el uso de otros fluidos (en particular agua-aire) y condiciones de flujo (de menor número de Reynolds) han sido estudiados experimentalmente con mayor detalle. Estos datos han conducido análisis numéricos de atomización primaria inspirados en los resultados de laboratorio. Tal es el caso de los chorros de agua en condiciones atmosféricas, que ha sido analizado por Bagué *et al.* [8] en problemas similares a los experimentos de Hoyt y Taylor [63] o los problemas de capas de mezcla

analizados por el grupo de Atomización y Flujos Complejos del Instituto D'Alembert [172, 48, 95], basándose en los experimentos de Matas *et. al.* [103].

Recientemente se han publicado resultados de convergencia en malla para un problema de capa de mezcla [93, 92], alcanzando resoluciones comparables a la escala de Kolmogorov estimada.

Todos los autores anteriores coinciden en que la interacción de la interfase con la turbulencia es un problema que requiere aún una caracterización detallada. Si bien se ha establecido que el crecimiento de inestabilidades de onda larga está acoplado a las mayores escalas de turbulencia, no se dispone de un método para estimar *a priori* el tamaño de las estructuras líquidas más pequeñas.

Otro fenómeno que se discute en la bibliografía es la formación de una capa de mezcla en la interfase. Esta región se forma dentro de la capa límite entre fases, donde los esfuerzos viscosos generan desprendimiento de gotas pequeñas que aceleran el intercambio de momento en el flujo. En las secciones siguientes se analizan con mayor detalle estos fenómenos.

5.2. Consideraciones generales

Partiendo de los avances citados en la sección anterior, considerando en particular los análisis respecto a costo computacional en [53, 92], se plantean en los siguientes párrafos cuáles son las principales cuestiones a tener en cuenta para la simulación DNS/ILES de inyección.

5.2.1. Principales problemáticas en la simulación de atomización

A partir del aumento de las capacidades de cómputo y el desarrollo de técnicas numéricas para la simulación de flujos multifásicos, a principios de la década del 2000 se han propuesto diversos enfoques para esta tarea. Gorokhosvski y Hermann [53] resumen los principales obstáculos para resolver todas las escalas de atomización mediante DNS:

1. Las propiedades del flujo son discontinuas, la representación numérica generalmente introduce errores que pueden producir resultados no físicos.
2. La tensión superficial debe implementarse con un esquema preciso, ya que es clave para los procesos de atomización secundaria.
3. La turbulencia y a las ondulaciones de la interfase provocan una gran amplitud de escalas espaciales y temporales.

4. La turbulencia es un fenómeno tridimensional, lo cual eleva los costos de simulación.
5. La deformación de la interfase ocurre rápidamente, la resolución temporal requerida es elevada.

Ling *et. al.* [94] realizan un estudio de convergencia en malla para un fenómeno de capa de mezcla en el cual observan que aún alcanzando la convergencia de algunas variables macroscópicas, ciertos resultados siguen siendo sensibles al refinamiento, en particular el diámetro mínimo de gota.

Este capítulo se centra en estudiar la formación de aerosoles a partir de la atomización de un chorro cilíndrico en condiciones similares a la inyección en un motor diesel. Los principales interrogantes a responder con este estudio son los siguientes:

- ¿Cuál es la escala de Kolmogorov para un caso de estudio dado? ¿Cómo varía al modificar las condiciones de inyección?
- ¿Cuáles son los requisitos de malla para resolver el crecimiento inicial de las inestabilidades hidrodinámicas por efecto de la turbulencia?
- ¿Puede obtenerse una representación precisa de las estructuras líquidas de gran escala aunque las pequeñas escalas de turbulencia no estén resueltas?
- ¿Cuál es el efecto de las inestabilidades de interfase en el desarrollo de la turbulencia multifásica?

5.2.2. Herramientas para la simulación de atomización

Las herramientas implementadas en Basilisk permiten resolver algunas de las dificultades mencionadas en la sección anterior.

En primera instancia, la formulación VOF-PLIC descrita en la Sección 4.5 representa la ubicación de la interfase mediante planos que marcan la discontinuidad de propiedades del fluido. Esta aproximación es de segundo orden, consistente con el nivel de precisión del algoritmo empleado para resolver las ecuaciones de Navier-Stokes, dado en la Subsección 4.3.2 [133]. Si, en este contexto, se utilizan los esquemas de advección *momentum-conserving* descritos en la sección 4.5.3, la descripción discreta del flujo preserva tanto el carácter discontinuo como el comportamiento físico del problema respondiendo a la problemática 1.

Por otra parte, la representación PLIC de la interfase permite emplear funciones altura para obtener estimaciones de la curvatura con una precisión de segundo orden.

Utilizando esta aproximación para el cálculo de la fuerza de tensión superficial, como se describió en la Sección 4.5.2, se responde a la problemática 2.

La implementación en grillas tipo *octree* permite el uso de AMR, no sólo para acotar el error numérico en la solución, sino también para lidiar con la amplitud de escalas espaciales del flujo (problemática 3). Respecto a la geometría de las estructuras líquidas, la capacidad de refinar localmente permite representar la deformación de interfase con un determinado paso de malla empleando una cantidad de celdas considerablemente menor que en una malla cartesiana uniforme. En cuanto a las escalas de turbulencia, el criterio de refinamiento descrito en la Sección 4.6 define un filtro LES adaptativo, aplicando mayor resolución de malla donde la variabilidad espacial del flujo es mayor. Si bien el carácter tridimensional de la turbulencia (problemática 4) no puede evitarse, acotar las escalas a resolver permite controlar la relación costo-precisión.

En cuanto al modelado de escalas de turbulencia subgrilla, se opta por no utilizar modelos de cierre explícitos, a fin de minimizar la complejidad del modelo y las variables de ajuste. Más aún, se pretende que las simulaciones resuelvan todas las escalas de turbulencia relevantes para la atomización, con lo cual el aporte de los modelos subgrilla debería ser despreciable.

Respecto a la discretización temporal del problema, la formulación explícita de la advección VOF es estable si el paso de tiempo respeta la condición $|\mathbf{u}|\Delta t < 0,5h$. Esto implica que por cada nivel de refinamiento aplicado, el paso de tiempo debe reducirse a la mitad, duplicando las iteraciones a resolver. De forma similar, la formulación explícita para la fuerza de tensión superficial impone un límite aún más restrictivo ($\Delta t < \sqrt{\rho h^3/\sigma}$), correspondiente al tiempo capilar de la menor onda representable en el paso de malla. De esta forma, como los límites de estabilidad del método numérico dependen de los tiempos característicos del problema físico, la problemática 5 se convierte en un requerimiento numérico del método *per-se*. Esto garantiza que si la simulación se mantiene estable, la resolución temporal es suficiente para capturar la evolución de la atomización.

5.3. Definición de los casos de estudio

Los casos estudiados a continuación consideran un escenario simplificado de inyección en una cámara de gas estanco. El líquido inyectado ingresa por un orificio circular de diámetro D_{inj} . El dominio es un cubo (Figura 5.1), cuyo lado tiene una longitud igual a 30 diámetros. La condición de contorno en la cara de inyección ($x = 0$)

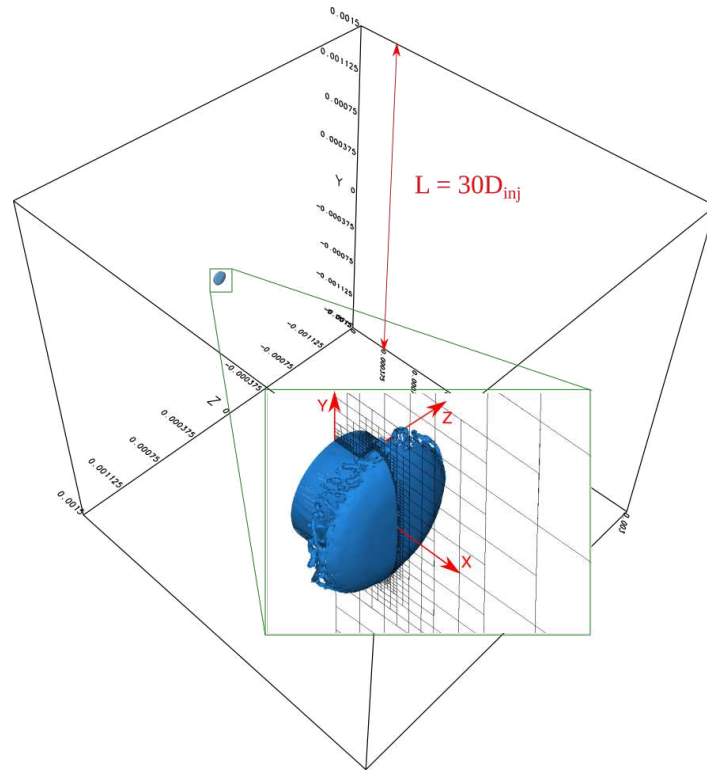


Figura 5.1: Vista isométrica: dominio y detalle de evolución inicial con refinamiento adaptativo

fija un valor de velocidad nula excepto en la sección de inyección ($\sqrt{y^2 + z^2} < D_{inj}/2$), en la que se impusieron diversos perfiles de velocidades, variables en el tiempo.

5.3.1. Propiedades y grupos adimensionales

Las simulaciones desarrolladas en este capítulo toman como referencia dos casos académicos a regímenes con números de Reynolds y Weber moderados, de manera que la amplitud de escalas sea relativamente reducida. Por un lado, se considera el caso de atomización en el trabajo de Ménard *et al.* [105]. Este conjunto de propiedades para cada fluido será notado como caso **M**. También se considera un caso de referencia de la ECN, conocido como *Spray A* [151] que en estas secciones será mencionado como caso **A**. Las propiedades que definen cada problema se encuentran listadas en la Tabla 5.1.

En todas las simulaciones se aplica refinamiento adaptativo basado en la estimación de error por *wavelets*, dada en la Ecuación 4.112 de la fracción de volumen \tilde{c} y del campo velocidad \mathbf{u} , estableciendo un error máximo tolerado $w(\tilde{c}) < 0,001$ y $w(\mathbf{u}) < 1$ m/s respectivamente. Asimismo, se aplica refinamiento para acotar la relación entre el paso de malla y la estimación local de la escala de Kolmogorov, $\eta(\mathbf{x}) < 10h(\mathbf{x})$, a fin

de mantener una representación de la turbulencia consistente en todas las regiones del dominio. Esta metodología es la misma empleada en [119, 120] y los resultados de este capítulo son una extensión de los análisis publicados en [118, 121, 122]

Parámetro	Ménard [105] (M)	Spray A [151] (A)
$\rho_g [\text{kg}/\text{m}^3]$	25	22.8
$\rho_l [\text{kg}/\text{m}^3]$	696	750
$\mu_g [\text{kg}/(\text{m s})]$	1×10^{-5}	$1,8 \times 10^{-5}$
$\mu_l [\text{kg}/(\text{m s})]$	$1,2 \times 10^{-3}$	$1,34 \times 10^{-3}$
$\sigma [\text{N}/\text{m}]$	0,06	0,02535
$D_{inj} [\mu\text{m}]$	100	90
$U_{inj} [\text{m}/\text{s}]$	100	100
ρ^*	27.84	32.89
μ^*	83.33	134.32
Re_l	5800	5037
We_l	11610	26623
Z	0.0186	0.0324
Re_g	25000	11092
We_g	417	810
Ma	0.175	0.167

Cuadro 5.1: Definición de parámetros para casos de atomización.

5.3.2. Condiciones de contorno

Como fue mencionado en el Capítulo 2, las condiciones de flujo dentro del inyector afectan significativamente la atomización. Dado que los casos se resolvieron empleando el algoritmo VOF incompresible de Basilisk, no es posible tener en cuenta la cavitación de forma consistente, por lo tanto sólo se analizan regímenes en el rango de flujo no cavitante. Asimismo, el número de Mach del problema (considerando temperaturas de ensayo del Spray A) se encuentra en el rango de validez del modelo incompresible.

El efecto del flujo interno en la boquilla estará dado exclusivamente por el perfil de velocidades impuesta en la sección de inyección. En este sentido, para el caso A se consideran tres condiciones de contorno diferentes detalladas en la Tabla 5.2.

La condición de contorno pulsante se inspira en condiciones de laboratorio [63, 8] y consiste en un perfil plano de velocidad cuya magnitud varía periódicamente con una frecuencia definida en términos adimensionales mediante el número de Strouhal (St),

$$U_x(t) = U_{inj} + U_p \sin(f 2\pi t) \quad f = \text{St} \frac{U}{L}. \quad (5.1)$$

Inyección	St	U_p/U_{inj}	l_{turb}	$I = \overline{u'u'}/U^2$	$U(r)$
Pulsante	1.3	0.1	-	-	U_{inj}
Turbulenta [79]	-	-	$0.1 D_{inj}$	0.05	$C(2,5 \ln(y^+) + 5,5)U_{inj}$
Combinada	1.3	0.1	$0.1 D_{inj}$	0.075	$C(2,5 \ln(y^+) + 5,5)U_{inj}$

Cuadro 5.2: Resumen de condiciones de contorno

Por otra parte, siguiendo el trabajo de Klein *et. al.* [79, 105, 151] se implementó una distribución de perturbaciones aleatoria correlacionada ($\mathbf{R}(\mathbf{x}, t)$) con una longitud de turbulencia dada (l_{turb}). El perfil medio de velocidades para este caso se computó mediante la ley de pared logarítmica [151] definida en la Tabla 5.2. La variable y^+ corresponde a la distancia a la pared adimensionalizada,

$$y^+ = \frac{|r_{inj} - r|}{\nu_l} \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_l}}. \quad (5.2)$$

donde el parámetro τ_w se ajusta de forma que el perfil de velocidades alcance el 95 % la velocidad media a una distancia igual al 10 % del radio. De esta manera, el perfil de velocidades para esta condición de contorno es,

$$\mathbf{U}_{turb}(t) = U_{inj}[\hat{i} + I \mathbf{R}(\mathbf{x}, t)] C[2,5 \ln(y^+) + 5,5], \quad (5.3)$$

donde \hat{i} es el versor en la dirección axial de inyección e I es la intensidad de la turbulencia, como se define en la Tabla 5.2. El campo aleatorio $\mathbf{R}(\mathbf{x}, t)$ se calcula siguiendo el algoritmo descrito por Klein *et al.* [79, 105, 151]. Resumidamente, la construcción de la función $\mathbf{R}(\mathbf{x}, t)$ está dada por las siguientes expresiones,

$$b_d = \frac{\tilde{b}_d}{\left(\sum_l^{-N_l \dots N_l} \tilde{b}_l^2\right)^{1/2}} \quad \tilde{b}_d = e^{-\frac{\pi}{2}(d^2/N_d^2)} \quad b_{i,j,k} = \Pi_{d=i,j,k} b_d \quad (5.4)$$

$$R_x(\mathbf{x}, t) = \sum_{i,j,k}^{-N_d \dots N_d} b_{i,j,k} \mathcal{R}_x(i, j + j_0, k + k_0, t) \quad (5.5)$$

donde los coeficientes $b_{i,j,k}$ permiten la integración discreta de los valores en la matriz aleatoria $\mathcal{R}_x(i, j + j_0, k + k_0, t)$ para lograr un campo $R_x(\mathbf{x}, t)$ con una función autocorrelación de longitud integral $l_{turb} = 2N_l \Delta_d$, siendo Δ_d la distancia en la dirección d entre los puntos en la matriz \mathcal{R}_x . Cada componente de $R_d(\mathbf{x}, t)$ se obtiene con un procedimiento análogo y con una matriz aleatoria propia \mathcal{R}_d , cuya actualización temporal consiste en un corrimiento de valores en el sentido x (coeficiente i). De esta manera, el

campo vectorial $\mathbf{R}(\mathbf{x}, t)$ es variable en el tiempo, se encuentra normalizado y cada una de sus componentes mantiene una correlación espacial isotrópica de radio l_{turb} .

Cabe notar que esta implementación se encarece considerablemente al incrementar la resolución, no sólo por el aumento de la cantidad de celdas sino también por la necesidad de emplear más datos aleatorios a fin de generar las escalas más pequeñas de turbulencia en la distribución \mathbf{R} . Finalmente, se consideró un caso con ambas condiciones de contorno superpuestas.

5.3.3. Resumen de simulaciones realizadas

A modo de sumario, la Tabla 5.3 nombra los casos simulados. Cabe destacar que los casos M se utilizaron para estudiar la convergencia en malla (MPG, MPM y MPF), mientras que los casos A se utilizaron para comparar condiciones de contorno (APG, AKG y ACG). La comparación entre casos A y M se realizó con la condición de inyección pulsante y el máximo nivel de refinamiento empleado (MPF y APF).

h (M)	Mènard	Spray A	BC (A)
$1,42\mu m$	MPG	APG (APF)	Pulsante
$0,71\mu m$	MPM	AKG	Klein
$0,48\mu m$	MPF	ACG	Combinada
BC (M)	Pulsante	$1,42(0,48)\mu m$	Malla (A)

Cuadro 5.3: Resumen de simulaciones realizadas.

La primera instancia de análisis consiste en la comparación visual de la interfase con los resultados de referencia en la bibliografía. Este contraste permite describir los mecanismos de fragmentación presentes en cada región del chorro, comparando las perturbaciones en la interfase que eventualmente provocan el desprendimiento de ligamentos y gotas.

Luego, a partir de estos resultados, se estiman las escalas características de atomización a fin de establecer los requerimientos para lograr DNS completo de atomización primaria.

5.4. Descripción visual de las estructuras de flujo

La Figura 5.2 muestra la interfase en intervalos de tiempo regulares a fin de realizar una descripción general de la atomización.

En estos fotogramas puede apreciarse cómo a medida que el chorro penetra en el dominio, una lámina líquida se extiende radialmente a partir de la punta, deformándose

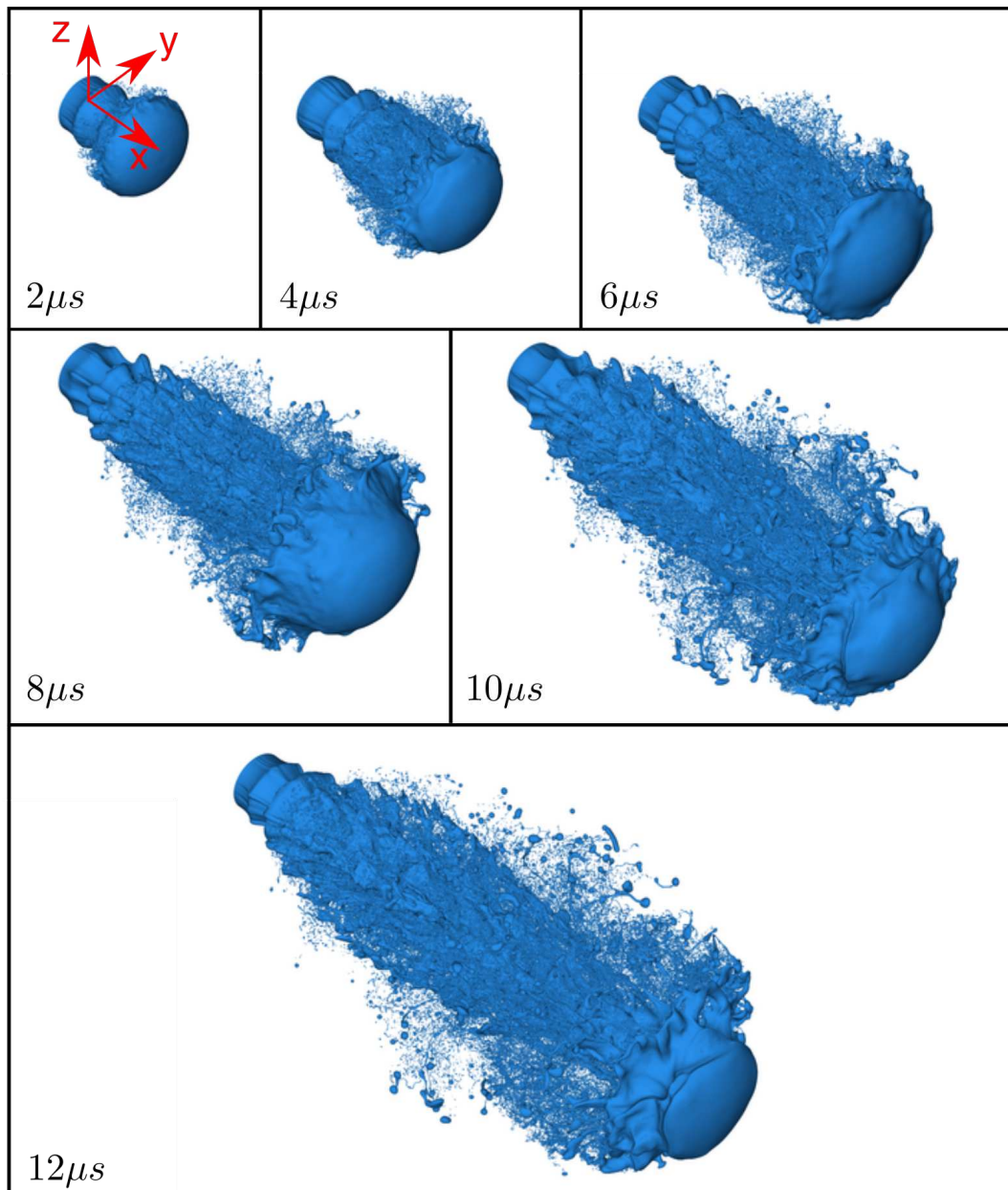


Figura 5.2: Vista isométrica: evolución temporal del caso MPF.

aguas arriba con forma de “paraguas” u “hongo” [159, 94]. A medida que transcurre el tiempo, la lámina aumenta su longitud y se deforma profusamente, sufriendo perforaciones que se expanden y producen el desprendimiento de las gotas y ligamentos de mayor tamaño.

La región cercana a la sección de inyección ($x \in [0, 2D_{inj}]$), en cambio, no presenta desprendimiento de gotas. Esta es la zona de desarrollo del flujo, donde los efectos aerodinámicos comienzan a deformar la superficie formando láminas que, a medida

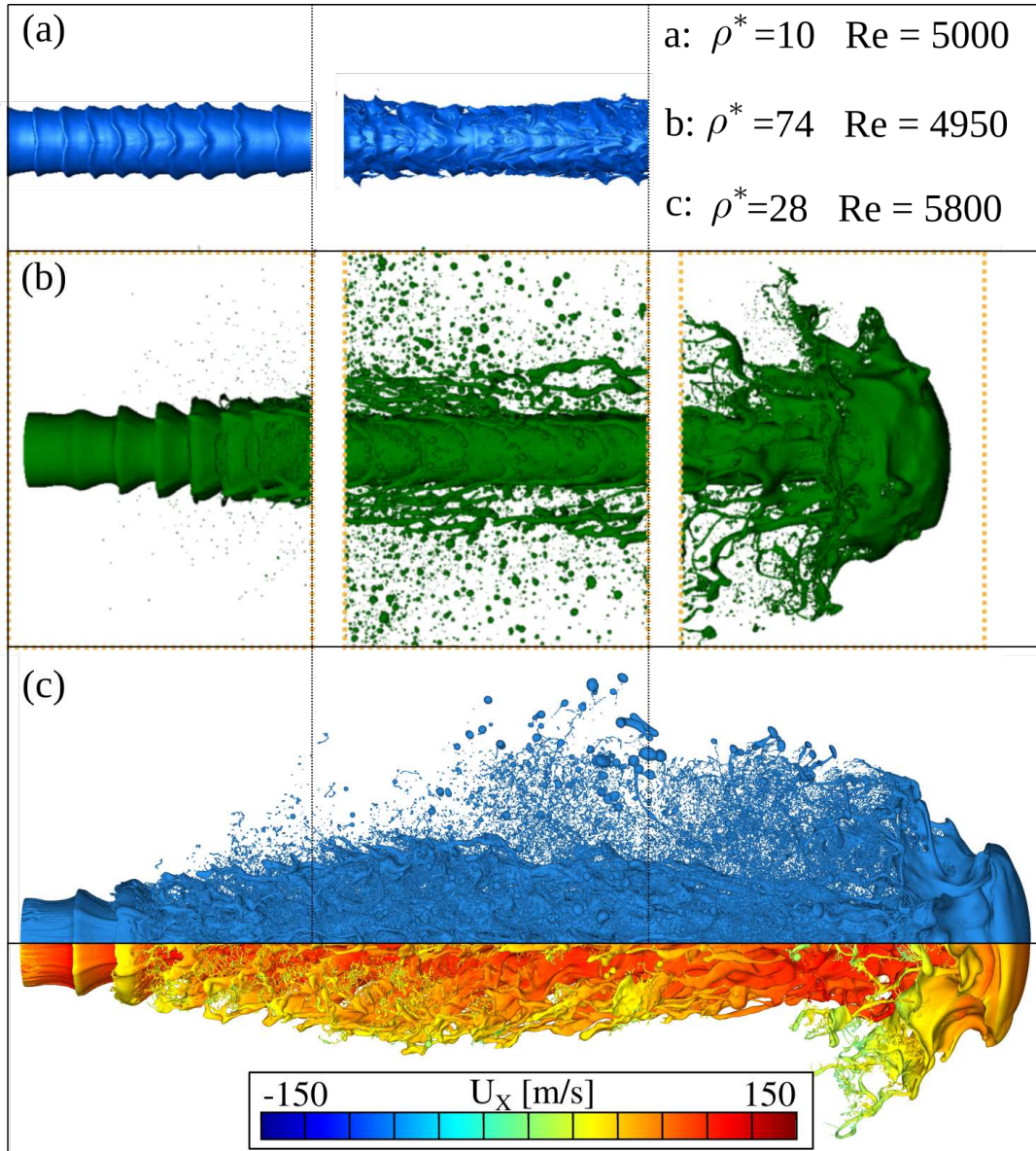


Figura 5.3: Comparación de mecanismos de atomización con referencias: (a) Jarrabashi *et. al.* [72], (b) Ling *et. al.* [94] (c) Caso MPF.

que penetren en el gas, reducirán su espesor hasta sufrir los mismos mecanismos de fragmentación que ocurren en la punta.

Finalmente, la extensión del chorro se encuentra rodeada de numerosas gotas con diversos tamaños. La densidad de la nube es tal que no puede apreciarse la forma en el núcleo del chorro. Por otra parte, cabe destacar que la presencia de gotas de gran tamaño en las zonas más alejadas del eje de inyección.

Así, el chorro puede dividirse en tres zonas: la **boquilla**, el **cuerpo** o **zona media** del chorro y la **punta** o **frente**. En la Figura 5.3 puede apreciarse una vista lateral

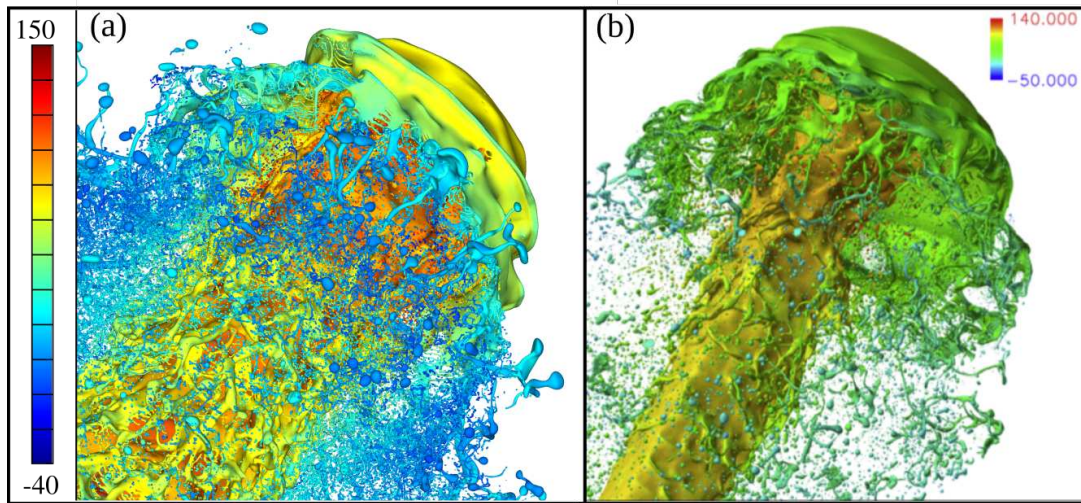


Figura 5.4: Vista anterior de la punta del chorro: (a) caso MPF ($Re = 5800$) y (b) resultados de Shinjo y Umemura ($Re = 3940$) [159].

en comparación con las simulaciones de Ling *et. al.* [72] y Jarrabashi *et. al.* [72] en regímenes de flujo similares. Los resultados reportados por Ling muestran una instancia posterior de simulación (equivalente a $t \approx 50\mu s$), donde la zona cercana a la boquilla y la punta presentan un comportamiento similar mientras que el cuerpo del chorro presenta una mayor extensión. El comportamiento observado en la zona media presenta gran similitud con las simulaciones de Jarrabashi *et. al.* (Figura 5.3 (a)), donde se analiza un chorro sometido a un corte aerodinámico constante con condiciones de contorno periódicas. Esta similitud confirma que las láminas en la zona media se forman debido al crecimiento de las inestabilidades de onda larga a partir de la boquilla. Posteriormente, se generan perturbaciones de onda corta (provocadas por interacción con los vórtices en la interfase [72, 73]) sobre las láminas que producen la perforación y fragmentación en ligamentos con una mecánica similar a la descrita para la punta del chorro.

La región inferior de la Figura 5.3 (c) muestra sólo el núcleo del chorro. Esta visualización permite corroborar el comportamiento reportado en [72, 94], observando también la velocidad de interfase en los ligamentos de la zona media. Así puede apreciarse que los filamentos formados en el cuerpo del chorro son de mayor diámetro que los desprendidos en la punta. También se observa que los ligamentos en el borde de la punta tienen una velocidad considerablemente menor.

La dinámica del frente se compara en la Figura 5.4 con los resultados expuestos en [159]. El caso MPF presenta una mayor gran cantidad de gotas pequeñas, cuya velocidad axial es prácticamente nula. Esta mayor tasa de atomización es coherente con la diferencia en los números de Reynolds del problema. Por otra parte, el núcleo

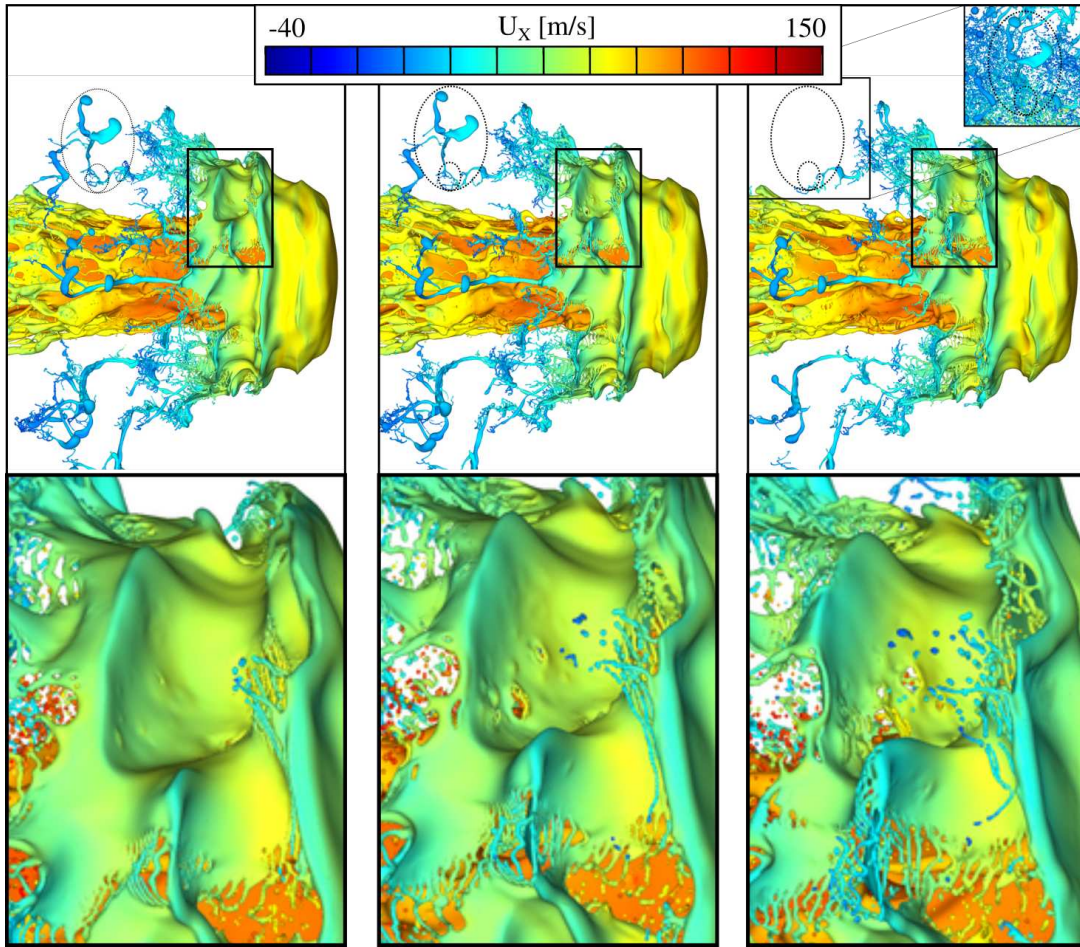


Figura 5.5: Vista lateral de núcleo líquido en caso MPF, $t = (9.4, 9.6, 9.8)\mu s$. Se resalta en dos óvalos un ligamento que se desprende del núcleo. Los detalles en la fila inferior corresponden región donde se observa perforación de láminas.

del caso MPF presenta una mayor deformación debido a la condición de contorno pulsante. Más allá de estas diferencias, en ambos casos se observa la presencia de ligamentos largos en el borde de la lámina frontal. Shinjo y Umemura reportan que los filamentos se forman en el borde al perforarse la lámina por efectos aerodinámicos y luego se cortan en secciones intermedias por efectos capilares. A medida que la punta del chorro avanza los ligamentos, detenidos por el arrastre aerodinámico, se distancian de la lámina hasta desprenderse finalmente.

Esta mecánica puede observarse con mayor detalle en la Figura 5.5, donde se resaltan ambos procesos de fragmentación: la formación de un agujero en la lámina frontal y el desprendimiento de un filamento por su estricción en un punto medio. En el primer caso la velocidad del líquido es aún considerable (aproximadamente 50m/s) con lo cuál es esperable que los efectos aerodinámicos sean significativos [157]. El

filamento desprendido, en cambio, se encuentra prácticamente en reposo y su diámetro es considerablemente reducido, por lo tanto es esperable que su comportamiento esté mejor descrito por inestabilidades de Plateau-Rayleigh o Rayleigh-Taylor [37].

5.4.1. Efecto de la turbulencia y estabilidad de gotas

La Figura 5.6 permite observar el desarrollo de los vórtices a lo largo del chorro. La iso-superficie de *Q-criterion* presenta un desarrollo suave en la punta y en la región cercana de la boquilla. En la región media puede observarse que los vórtices pierden la simetría axial, reduciendo considerablemente su longitud característica. Esta evolución denota el decaimiento de la turbulencia propio de la cascada de energía discutida en la sección 3.3. Por lo tanto, las estructuras de flujo de mayor longitud característica se encuentran en la punta y en la boquilla, mientras que los vórtices más pequeños (escalas disipativas e isotrópicas) se distribuyen en la región media del chorro. En la extensión del chorro también se observa que, a mayor distancia del eje, los vórtices pierden intensidad (no alcanza el valor de iso-superficie de *Q*) y que las gotas de mayor tamaño presentan su forma esférica, alcanzando un estado estable.

Este comportamiento parece indicar que las regiones donde se desarrollan los mecanismos de atomización son aquellas donde las grandes estructuras de flujo se

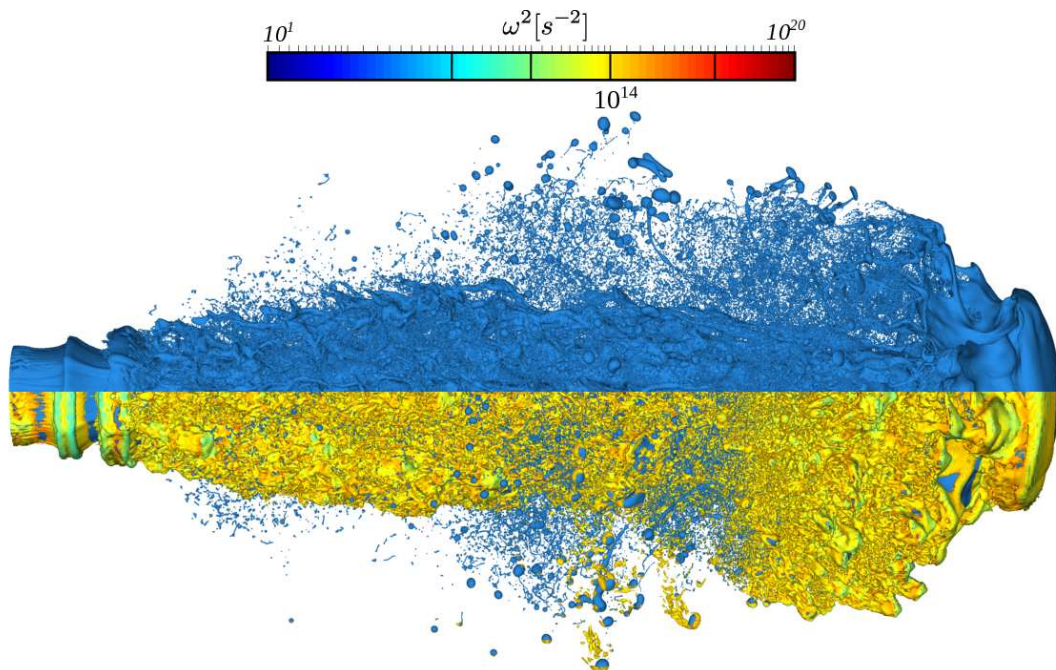


Figura 5.6: Iso-superficie *Q-criterion* coloreada por enstrofia en escala logarítmica (caso MPF, $t = 12.00 \mu s$).

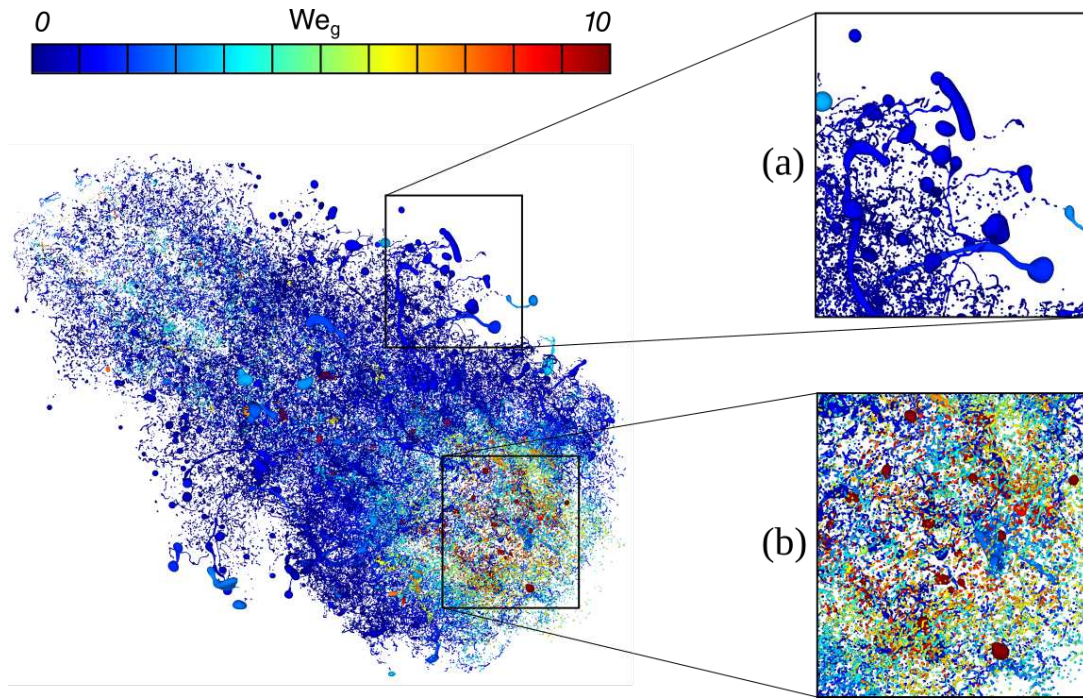


Figura 5.7: Nube de gotas para caso MPF. Detalles de gotas: externas (a) y en la región interna de la punta (b).

inestabilizan y pierden simetría. A su vez, las estructuras líquidas estables parecen ubicarse en regiones donde la intensidad turbulenta es menor.

Por otra parte, los valores de enstrofia ($\Omega = 2\omega^2$) observados en la la capa de mezcla de la zona media son de orden $10^{14}s^{-2}$, lo que denota un alto nivel de corte en el flujo. Tanto en la punta como en la boquilla se observan valores considerablemente menores. Es decir, las regiones con menor vorticidad son las que presentan mayor coherencia de la interfase del chorro.

A fin de analizar la estabilidad aerodinámica las estructuras producto de la atomización primaria, la Figura 5.7 muestra sólo el aerosol coloreado por We_g , donde se observa que las gotas de la periferia del *spray* (a) se encuentran en condiciones de flujo estables ($We_g \ll 10$) y que sólo las gotas cercanas al núcleo, particularmente en el interior del paraguas de la punta (b), son susceptibles de sufrir atomización secundaria por efectos aerodinámicos. Cabe notar que en la periferia existen gotas casi esféricas (que permanecerán estables) como ligamentos susceptibles a fragmentarse por inestabilidades de Plateau-Rayleigh.

El hecho de que las gotas de mayor porte tengan una velocidad tan reducida es producto de que las mismas se han desprendido de la punta del chorro y, debido a su baja velocidad, no se han desplazado axialmente.

De esta manera, se observa que los mecanismos inerciales de atomización actúan casi en su totalidad en la superficie del núcleo y que las estructuras desprendidas son mayoritariamente estables.

5.4.2. Efectos de modelado: condición de contorno y paso de malla

Otro aspecto que se discute en la bibliografía es la condición de contorno para modelar la turbulencia en el inyector [151]. La Figura 5.8 muestra en vista lateral el perfil VOF del caso MPF en comparación con los resultados de Mènard *et al.* [105] y Salvador *et al.* [151]. Ambas referencias aplican una condición de contorno análoga a la descrita en la Ecuación (5.4), pero el caso (c) aplica una mayor intensidad de turbulencia.

Los casos de referencia presentan deformaciones de onda larga con menor amplitud y sin un ordenamiento claro. Estas perturbaciones, además, tienen una longitud de desarrollo mayor que en el caso pulsante. Otra diferencia destacable entre los casos es que a mayor nivel de turbulencia, menor coherencia en la punta del chorro.

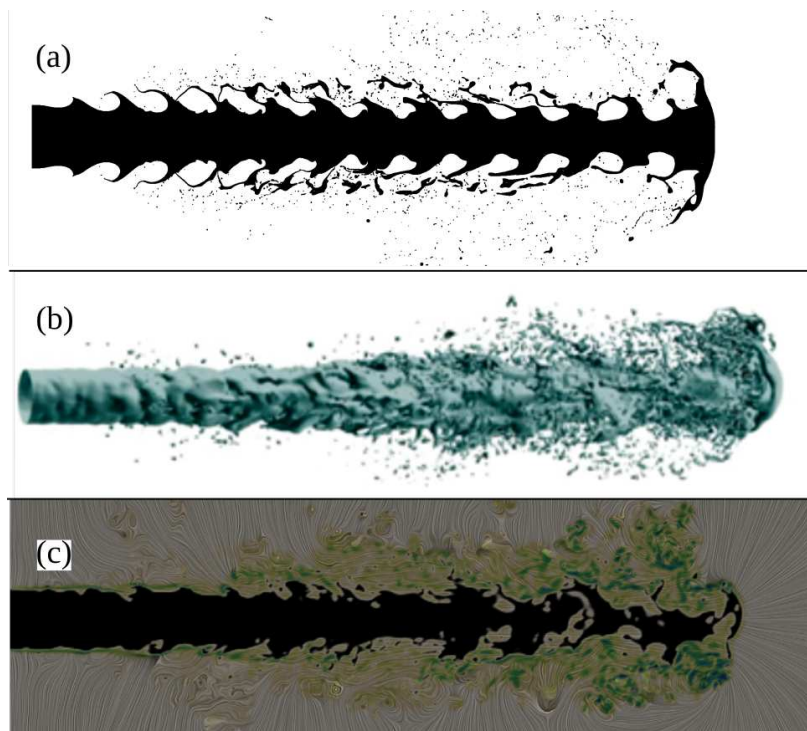


Figura 5.8: Vistas lateral de VOF para MPF (a), comparación con casos de referencia: Mènard [105] (b) y Spray A [151] (c). Resultados a $t = 10\mu\text{s}$. Pasos de malla $h = (0,48; 1,1; 2,3)\mu\text{m}$ respectivamente.

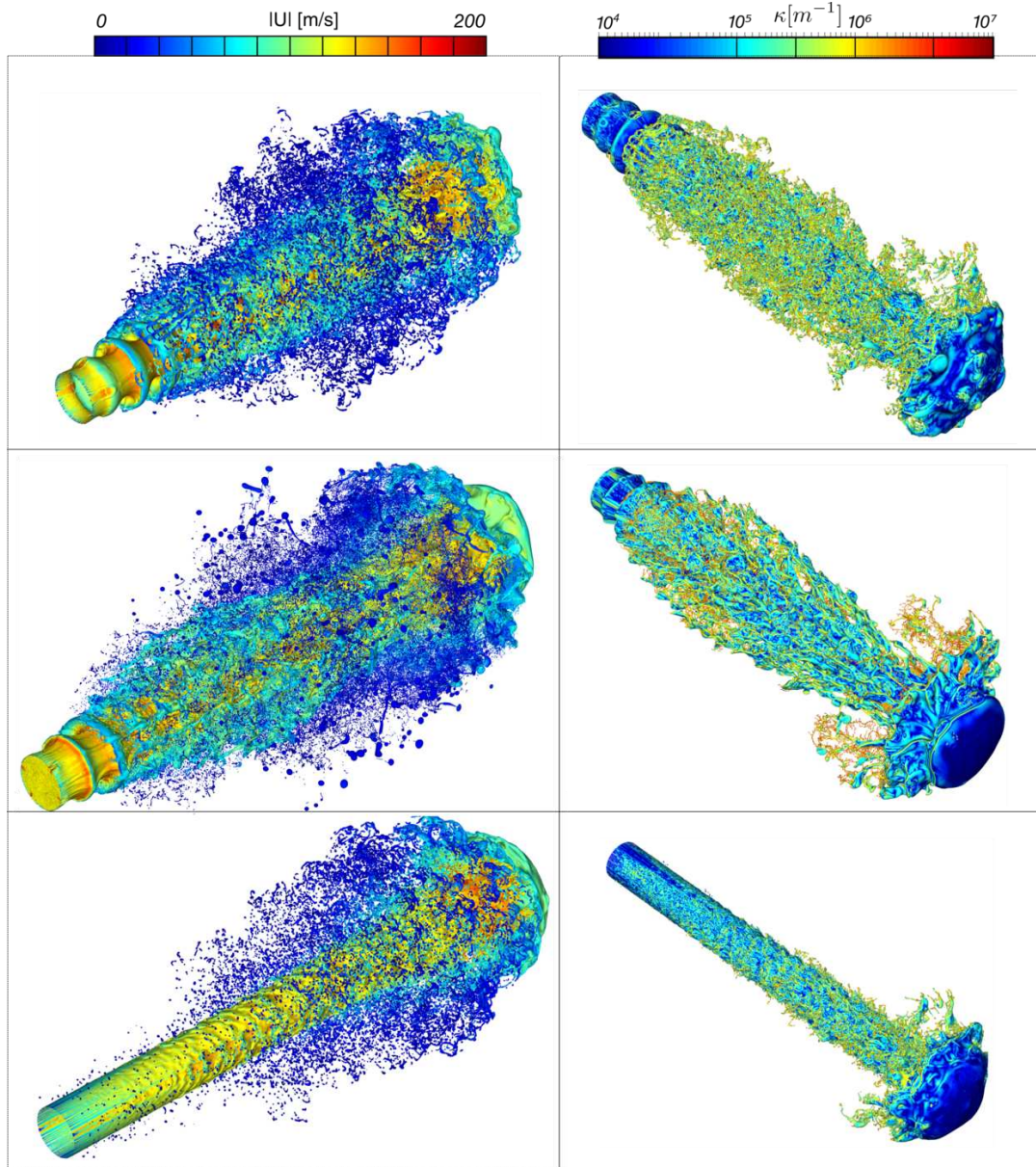


Figura 5.9: Vistas isométricas de los casos MPG, MPF y AKG(arriba hacia abajo). Representación de magnitud de velocidad (izquierda, chorro y gotas), curvatura de superficie (derecha, núcleo coherente). Fotogramas a $t = 12\mu\text{s}$.

Si bien todas estas diferencias pueden atribuirse a la condición de inyección turbulenta, existen otros factores que podrían influir. Los casos con mayor paso de malla, por ejemplo, presentan una fragmentación más rápida. Por otra parte, las tres simulaciones se desarrollaron con diferentes software (Basilisk , ARCHER y PARIS respectivamente).

A fin de reducir las diferencias entre casos, se comparan en la Figura 5.9 tres simulaciones similares desarrolladas en esta tesis: MPG, MPF y AKG. Del lado

izquierdo se exponen los chorros completos coloreados por magnitud de velocidad. Todos los casos presentan gotas prácticamente en reposo y una concentración mayor de gotas en la región cercana a la punta, donde también alcanzan el mayor alejamiento del eje.

Las inestabilidades a partir de la boquilla en el caso AKG tienen una longitud de desarrollo considerablemente mayor. Las perturbaciones no pueden apreciarse a menos de 4 diámetros de la boquilla. Transcurrida esta distancia, las estructuras turbulentas provocan un corrugado asimétrico de la superficie que conduce a una producción de ligamentos más irregular que en los casos pulsantes. En contraste, la longitud de desarrollo en MPG y MPF es aproximadamente $2D_{inj}$

Por otro lado, el caso MPG parece presentar mayor volumen atomizado que MPF, en gotas de forma más irregular. Al comparar las puntas de los núcleos (derecha) en ambos casos, se observa que la malla gruesa presenta más deformación y fragmentación. Asimismo, la curvatura (representada en escala de colores) asume en MPG valores que no pueden representarse con la malla ($\kappa = 10^6 \text{ m}^{-1} > 1/h$). Esta característica es fruto de la fragmentación numérica, que actúa también en la punta del chorro, destruyendo rápidamente la coherencia de las láminas formadas.

El caso refinado MPF, si bien también sufre de falta de resolución en algunas regiones de la zona cercana a la boquilla y las láminas desprendidas de la punta, presenta una superficie con curvatura considerablemente más suave. Asimismo, el núcleo muestra desprendimientos de ligamentos y gotas con forma definida. En la capa externa de gotas del caso MPF, además, puede observarse una cantidad considerable de estructuras esféricas.

Cabe notar en el caso AKG que la punta se mantiene relativamente coherente a pesar de emplear el mismo paso de malla que MPG.

En síntesis, se verifica cualitativamente que tanto el paso de malla como la condición de contorno afectan la tasa de atomización. La turbulencia sintética empleada por Klein produce una mayor longitud de desarrollo y, por lo tanto, una menor población de gotas en los instantes iniciales. A diferencia de los casos de referencia, la punta del chorro se mantiene coherente en el problema AKG.

5.4.3. Validación a partir de datos experimentales

Existen pocos datos experimentales en la bibliografía que pueden emplearse a fin de validar DNS de atomización primaria para inyectores en motores. Esto se debe a diversos factores.

Por un lado, los métodos experimentales actuales permiten estudiar propiedades generales del *spray* en regímenes de flujo relativamente desarrollado. Más aún, los

datos que pueden obtenerse en estos experimentos son dimensiones de la nube de gotas (*e. g.* ángulo de cono y penetración), distribución espacial de líquido y vapor en la cámara de combustión, y cantidad inyectada de masa y momento lineal. A su vez, los experimentos suelen diseñarse en condiciones cercanas a la operación del inyector en un motor, a fin de que las mediciones sean representativas de la aplicación tecnológica.

Estas características de los ensayos de laboratorio implican varias dificultades para lograr resultados DNS que puedan contrastarse con los datos experimentales.

En primera instancia, el costo computacional de estas simulaciones sería demasiado elevado por dos cuestiones. Por un lado alcanzar un régimen estadísticamente estacionario ($t > 1000\mu s$) implica tiempos de cálculo muy superiores a los usualmente simulados mediante DNS ($t \leq 100\mu s$).

A raíz de este inconveniente, se han desarrollado algunos experimentos estudiando la región cercana a la boquilla en los primeros instantes de inyección. El trabajo de *Ghiji et. al.* [51], por ejemplo, obtiene imágenes utilizando por microscopía óptica de alta velocidad e iluminación láser en una cámara de *spray* presurizada. El artículo mencionado incluye fotografías con precisión de $0.84\mu m$ por pixel, reproducidas en la Figura 5.10. Aún con este equipo de alta tecnología, los autores sólo pueden caracterizar la forma y penetración del *spray*.

A su vez, los regímenes de inyección estudiados experimentalmente poseen números de Reynolds y Weber muy elevados y, por lo tanto, presentan una gran amplitud de escalas: el diámetro de las gotas en el *spray* puede diferir del diámetro del inyector en más de 4 órdenes de magnitud. Si la cámara de combustión tiene una longitud de 20 diámetros, por ejemplo, la malla cartesiana uniforme necesaria para resolver este problema tendría más de 20×10^{12} celdas.

En general, la solución de compromiso para validar DNS es resolver regímenes con Re_l y We_l moderados y reconocer que los resultados son sólo representativos de los primeros instantes de inyección. Es decir, los experimentos brindan resultados de las grandes escalas del problema a regímenes de alto número de Reynolds y la validación de simulaciones requiere información de las escalas pequeñas a regímenes de bajo número de Reynolds.

Por otra parte, las mediciones geométricas sobre los aerosoles son cualitativas y pueden reproducirse con simulaciones de baja precisión. El caso contrario es aún menos alentador: algunas elementos del experimento que no pueden reproducirse en la simulación numérica (*e. g.* defectos la geometría del inyector) podrían afectar significativamente los datos; en este contexto, los errores de modelado en la simulación serían más relevantes que los errores numéricos.

Teniendo estas dificultades en mente, se presenta una validación mediante los datos experimentales reportados en [191]. Los mismos fueron obtenidos por Wu, Reitz y

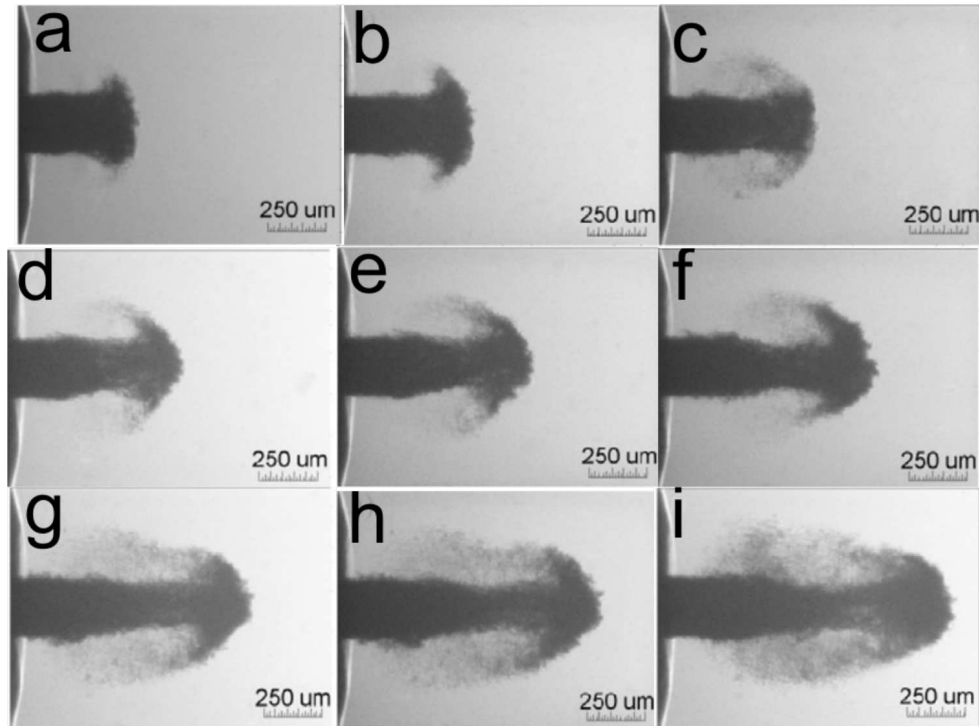


Figura 5.10: Microscopías en cámara de *spray* [51]. Fotografías espaciadas cada $1\mu s$ en el rango $(5,13)\mu s$

Bracco en una cámara de inyección donde determinaron los diámetros de gotas en la región externa del cono del *spray*. Si bien los inyectores y condiciones de inyección empleados presentan diferencias considerables entre sí, todos los experimentos se desarrollan en regímenes moderados de Re_l ($\mathcal{O}(10^4)$) y We_l ($\mathcal{O}(10^4)$). Así, en el trabajo original las mediciones finalmente se ajustan con una única distribución acumulativa tipo χ^2 . Para la comparación realizada en esta tesis, se ajustaron los datos con una distribución *log-normal*, ya que la misma presentó un error menor en el proceso de ajuste.

La Figura 5.11 representa los datos de las series de Wu superpuestos con los histogramas acumulativos normalizados para diferentes instantes de tiempo del caso MPF. Si bien los resultados numéricos parecen estar levemente desplazados hacia la izquierda, en términos generales se observa un buen acuerdo, con Errores Cuadráticos Medios (E_{RMS}) de aproximadamente 5 %. El aparente exceso de gotas pequeñas en los resultados numéricos puede deberse a diversos factores: la dificultad de detectar estas gotas visualmente, su rápida tasa de evaporación (no considerada en las simulaciones) o el hecho de que las distribuciones se realizaron con todas las gotas atomizadas y no sólo con la capa exterior de la nube.

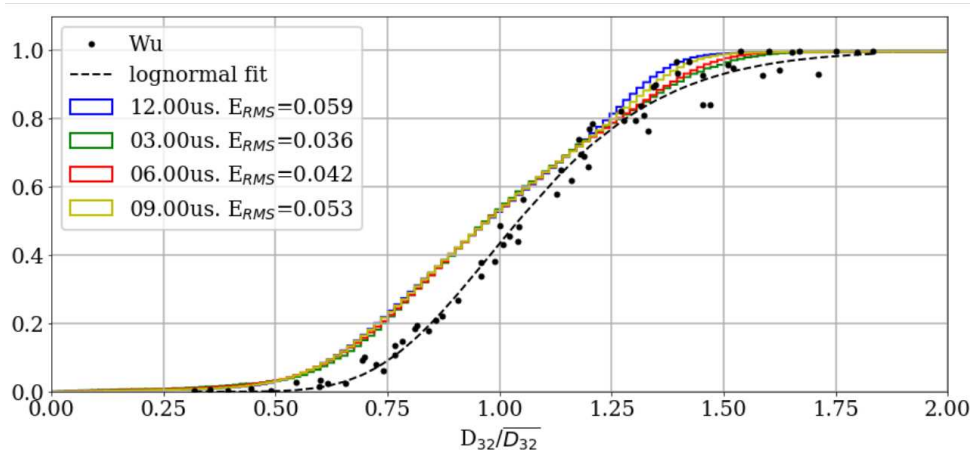


Figura 5.11: Comparación de distribución de gotas para el caso MPF con datos experimentales [191].

5.5. Caracterización comparativa de casos

En las subsecciones siguientes se evalúan los cambios en las características de la nube de gotas producidos por variaciones de la condición de contorno, la tensión superficial y el paso de malla. Este conjunto de pruebas permite cuantificar hasta qué punto los errores numéricos de la simulación afectan el comportamiento físico de la atomización primaria.

La caracterización estadística de cada caso se realiza mediante histogramas, una representación en gráfico de barras que muestra la cantidad (frecuencia) de gotas (individuos) dentro de rangos preestablecidos (grupos) de una determinada propiedad (tamaño, posición, velocidad, etc). Las principales variables geométricas consideradas son el diámetro equivalente en volumen (D_{30}) el diámetro de Sauter (D_{32}) y la esfericidad (ψ), definidas a continuación,

$$D_{30} = \left(\frac{6V}{\pi} \right)^{1/3} \quad D_{32} = \left(\frac{6V}{A} \right) \quad \psi = \pi^{1/3} \frac{(6V)^{2/3}}{A} = \frac{D_{32}}{D_{30}}. \quad (5.6)$$

donde el D_{30} sólo considera el tamaño de la gota, ψ cuantifica su grado de deformación y el D_{32} es una combinación de los otros parámetros. Otras variables analizadas son la posición y velocidad de cada gota. En general, las estadísticas no tienen en cuenta las propiedades del núcleo, es decir, sólo consideran las gotas totalmente desprendidas del chorro.

En algunos casos, los histogramas se normalizan y ajustan por una Función Distribución de Probabilidad (PDF) $f(x)$. Otra opción para visualizar los resultados es emplear una Función Distribución Acumulativa (CDF), que equivale a la función

integral de la PDF $\int_0^x f(x') dx'$. Tanto en los histogramas como en las distribuciones pueden aplicarse una función peso para considerar proporciones respecto a una variable de interés en lugar de cantidad de gotas. Por ejemplo, en un histograma pesado por volumen de las gotas, cada barra representará el volumen líquido total en el rango de interés.

Las secciones subsiguientes presentan comparaciones que permiten analizar la influencia de algunos parámetros en la simulación:

- Condiciones de contorno: casos APG, AKG y ACG.
- Propiedades de flujo: casos MPF y APF.
- Paso de malla: casos MPF, MPM y MPG.

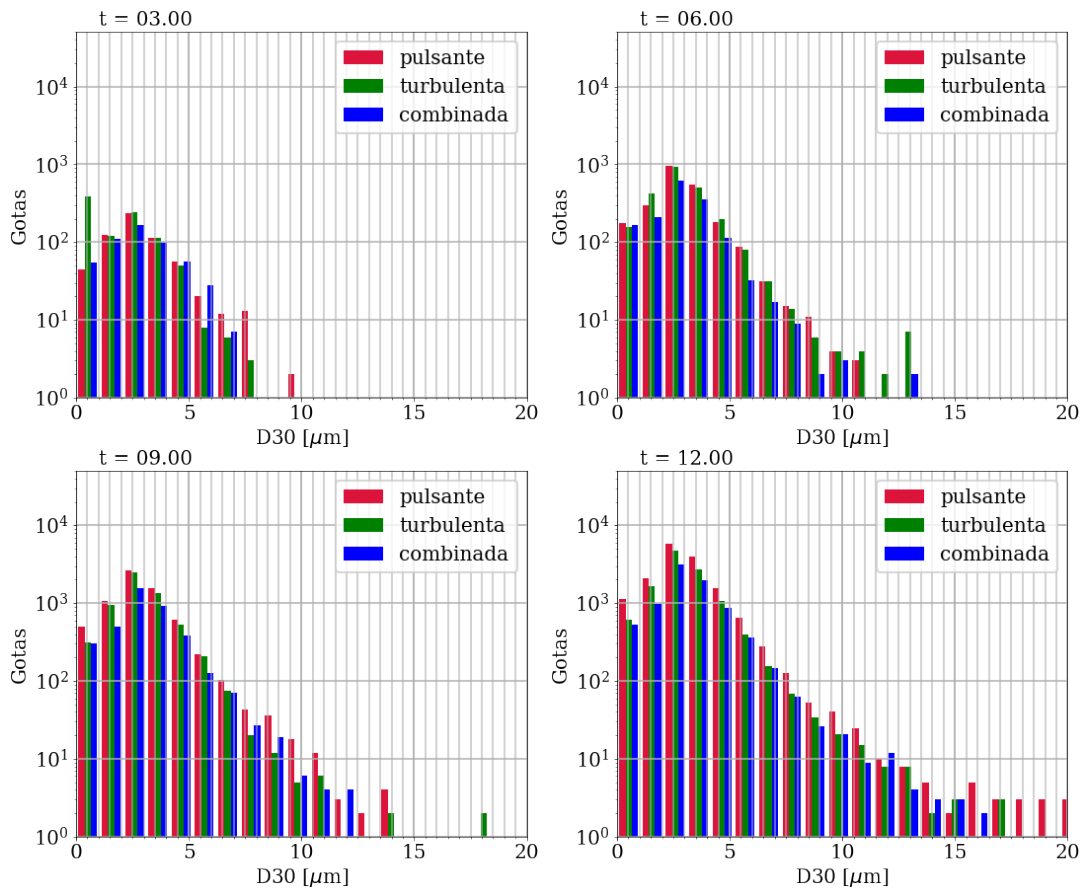


Figura 5.12: Caso A, comparación de condiciones de contorno: histograma de tamaño de gotas

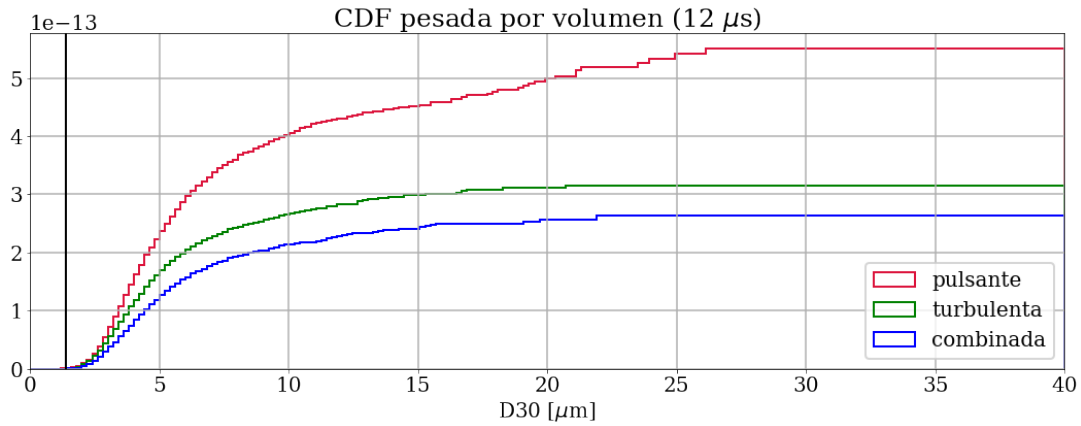


Figura 5.13: Caso A, comparación de condiciones de contorno: distribución acumulativa en volumen

5.5.1. Efecto de la condición de contorno

Esta sección compara los efectos de las condiciones de contorno listadas en la tabla 5.2 para casos A utilizando un paso de malla $h = 1.42 \mu m$, siendo una extensión cuantitativa del análisis en la sección 5.4.2.

En primera instancia, los histogramas de la Figura 5.12 muestran que la población de gotas en el caso pulsante es mayor que en los otros casos para casi todos los rangos de diámetro. Teniendo en cuenta la escala logarítmica, puede observarse que las poblaciones de gotas son hasta tres veces más numerosas que los casos con condición de contorno turbulenta.

Debido a esto, el volumen atomizado en el caso pulsante es el doble, como puede observarse en la distribución acumulativa de la Figura 5.13.

Asimismo, puede notarse que el caso pulsante también presenta estructuras de mayor tamaño, logrando gotas de $D_{30} \approx 30 \mu m$, hecho que también se evidencia en los histogramas de la Figura 5.15, donde también notarse que aproximadamente el 40% del volumen de gotas se encuentra en estructuras con We_g superior a 6. Sin embargo, las gotas parecen mantenerse estables debido al bajo Re_g del flujo.

En cuanto a la evolución de las variables globales del *spray*, la principal diferencia que puede apreciarse es la evolución del Diámetro Medio de Sauter (\overline{D}_{32}) en la Figura 5.14, donde se observa que el caso turbulento presenta un decrecimiento más lento de esta variable. Esto es fruto del mayor tiempo de desarrollo de las perturbaciones de onda larga a partir de la propagación de la turbulencia desde el seno del fluido hacia la interfase, que también es responsable de la escasa atomización en la región cercana al punto de inyección.

La Figura 5.16 expone la evolución temporal de los histogramas. En esta representación puede notarse que las gotas de gran diámetro requieren tiempos de formación similares ($\approx 8 \mu s$) en todos los casos. Esto implica que el desprendimiento de ligamentos en la punta del chorro es independiente de las inestabilidades desarrolladas en la zona media.

Los fotogramas muestran también que la pulsación acelera la evolución de inestabilidades de onda larga, favoreciendo la erosión de la interfase provocando fragmentación a menos de dos diámetros de la boquilla. Por otra parte, la vista lateral muestra que la expansión radial de la nube es menor en los casos con el perfil de velocidades logarítmico.

Sumario sobre el efecto de las condiciones de contorno

La comparación entre las condiciones de contorno estudiadas permite observar que:

- El perfil de velocidad en la inyección define la evolución de las inestabilidades hidrodinámicas a partir de la boquilla. Esto a su vez afecta significativamente la tasa de atomización. Este resultado es consistente con las observaciones experimentales discutidas en el Capítulo 2.
- Las mayores tasas de atomización se obtienen en los casos en que la condición de contorno induce las inestabilidades hidrodinámicas de crecimiento más rápido, reduciendo la longitud de desarrollo de la capa de mezcla.
- Este fenómeno afecta principalmente la producción de gotas pequeñas.

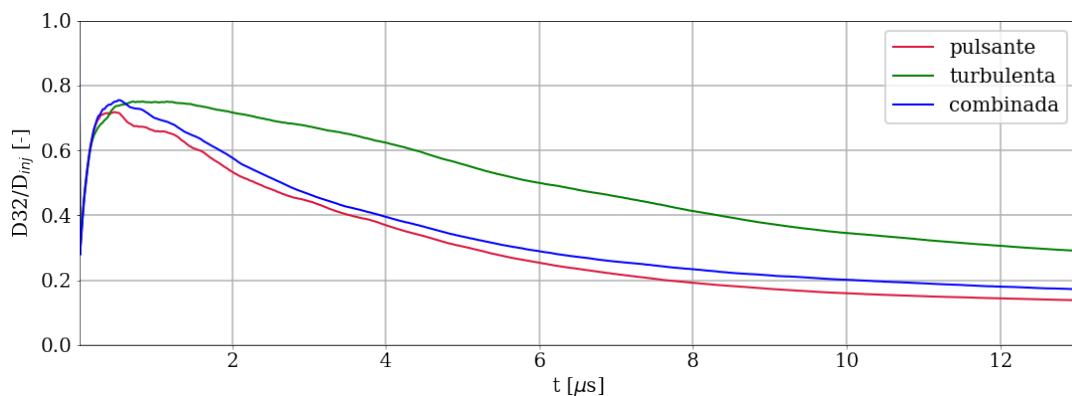


Figura 5.14: Caso A, comparación de condiciones de contorno: evolución temporal del diámetro medio de Sauter.

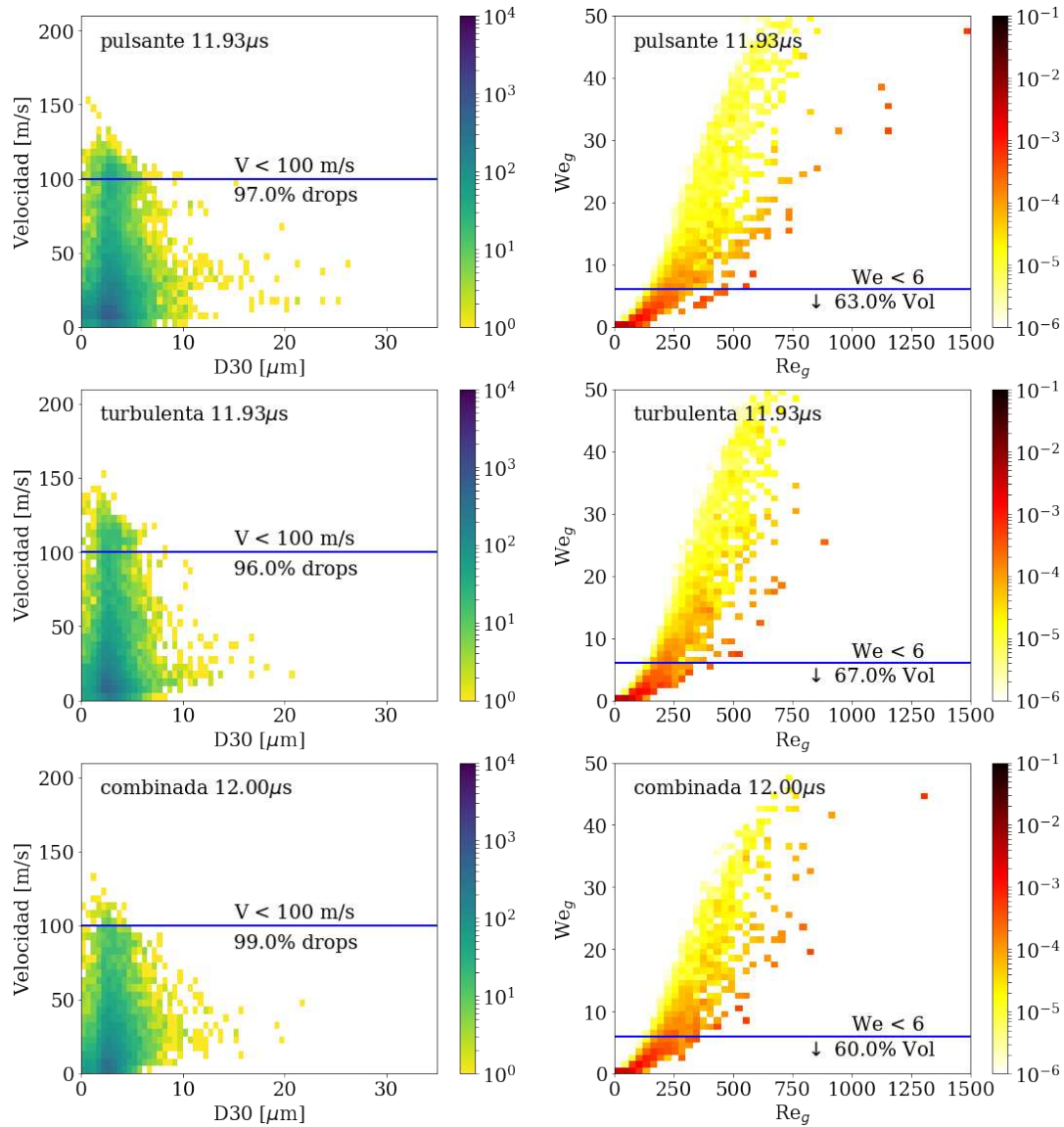


Figura 5.15: Caso A, comparación de condiciones de contorno: histogramas de dos vías

- La dinámica de fragmentación en la punta del chorro no parece significativamente afectada por el perfil de velocidad en la inyección. Si bien el caso MPG presenta mayor deformación de la zona frontal, todas las simulaciones preservan la coherencia en la punta.
- Lógicamente, el Diámetro Medio de Sauter del líquido se reduce más rápidamente para los casos de mayor atomización. No obstante, a medida que el chorro en el gas la tasa de cambio del \overline{D}_{32} parece estabilizarse en todos los casos.

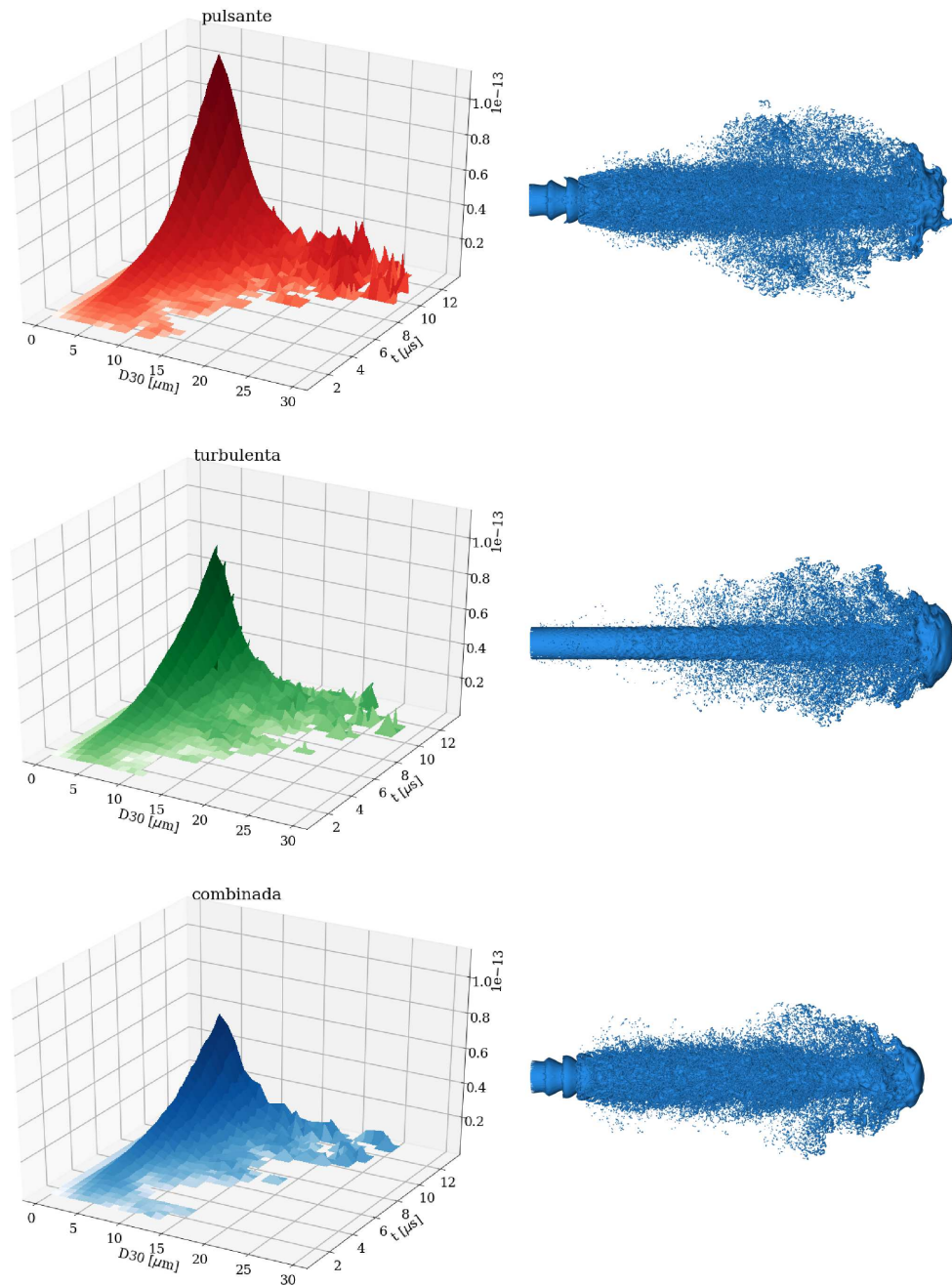


Figura 5.16: Caso A, comparación de condiciones de contorno: evolución temporal de los histogramas y fotograma lateral de la condición final ($t = 13\mu s$).

Remark: El perfil de inyección afecta mayormente a la región cercana a la boquilla de inyección. A medida que transcurre el tiempo, los mecanismos de fragmentación en la punta y en la capa de mezcla se tornan dominantes.

5.5.2. Variación de la tensión superficial

Como puede apreciarse en la Tabla 5.1, la principal diferencia entre los casos analizados radica en su tensión superficial. Es esperable que la configuración M, al tener un mayor valor de σ , pueda mantener estructuras coherentes de mayor tamaño. A modo introductorio, la Figura 5.17 muestra el nivel de resolución de curvatura en el núcleo y la velocidad axial de todas las estructuras líquidas. El caso APF presenta valores de curvatura más cercanos al límite de resolución ($\kappa > 1/h$) con lo cual es esperable que las gotas producidas por atomización sean de un diámetro menor que en el caso MPF. En ambos casos, la punta ha perdido coherencia y se observan las estructuras fragmentadas a partir del anillo basal. Asimismo, es importante notar que

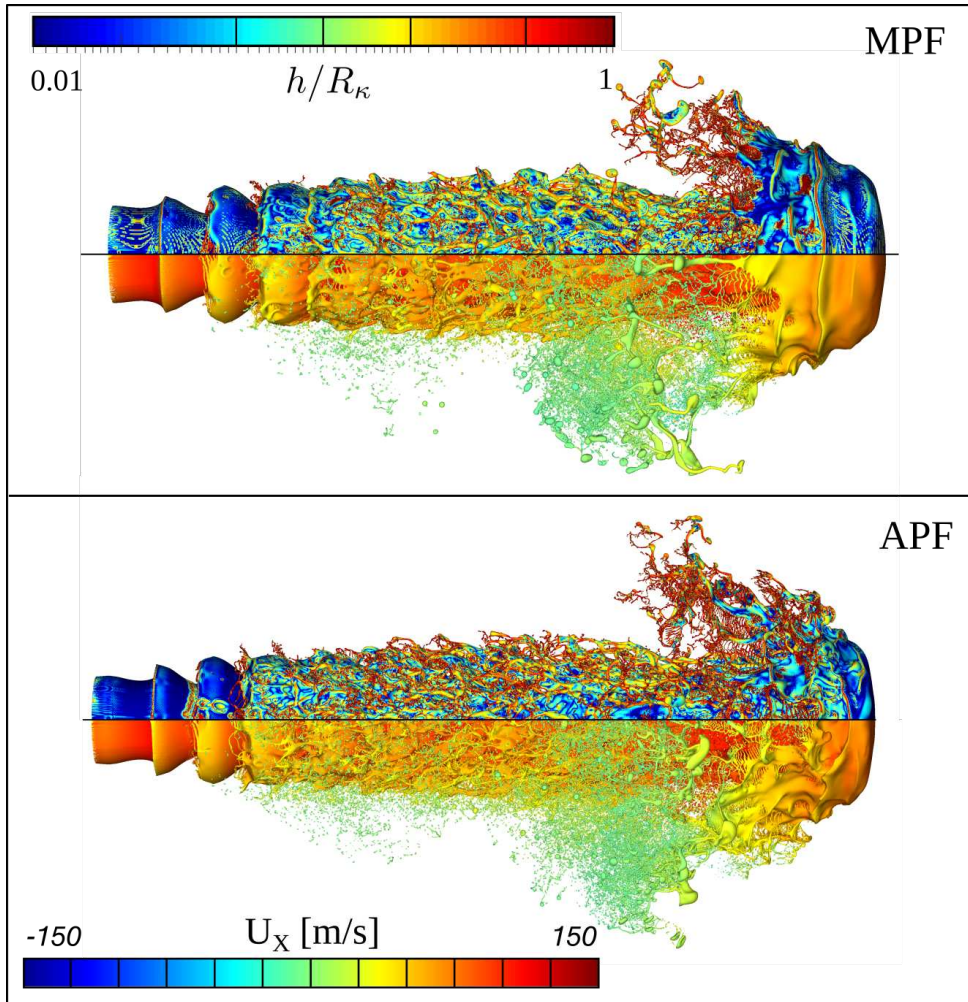


Figura 5.17: Casos pulsantes M y A: Vista lateral, escala de colores por curvatura (mitad superior) y velocidad axial (mitad inferior), $t = 9\mu s$. Las escalas son válidas para ambos casos.

las gotas ubicadas en la región media de esta imagen se encuentran prácticamente en reposo, con menor velocidad a mayores distancias del eje.

La representación en histograma (Figura 5.18) permite observar que el total de gotas es del orden 10^5 y que la mayoría de las estructuras tienen un diámetro aproximadamente de $1.5 \mu\text{m}$ (es decir, 3 celdas del mínimo paso de malla).

En cuanto a la proporción de los tamaños de gotas, el caso A muestra una mayor cantidad de gotas pequeñas ($D_{30} < 2\mu\text{m}$) que el caso M. Para tamaños de gotas mayores, la cantidad de gotas se mantiene similar. El caso M desarrolla una mayor cantidad de gotas de gran porte ($D_{30} > 10\mu\text{m}$, ligamentos que se desprenden de la punta) estas estructuras son en general de menor tamaño que en el caso A.

Otro aspecto destacable en el histograma es la fragmentación de las gotas de mayor tamaño. Las gotas de $D_{30} = 23\mu\text{m}$ del caso A a $t = 9\mu\text{s}$ ya no existen en $t = 11\mu\text{s}$, donde la gota de mayor diámetro no alcanza los $20\mu\text{m}$. Esta gráfica no permite

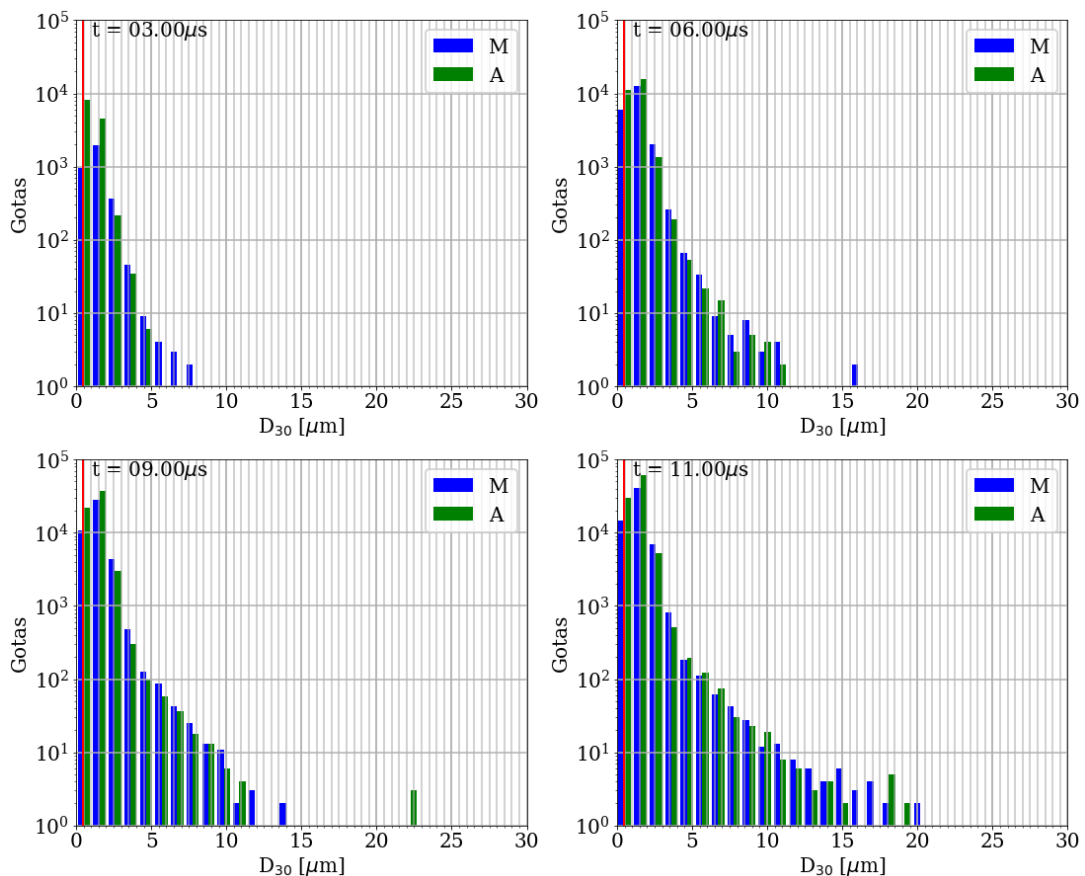


Figura 5.18: Casos pulsantes M y A, histogramas: diámetro de gotas para casos pulsantes M y A, a tiempos 3, 6, 9 y $12\mu\text{s}$. Gotas agrupadas en rango de $1\mu\text{m}$

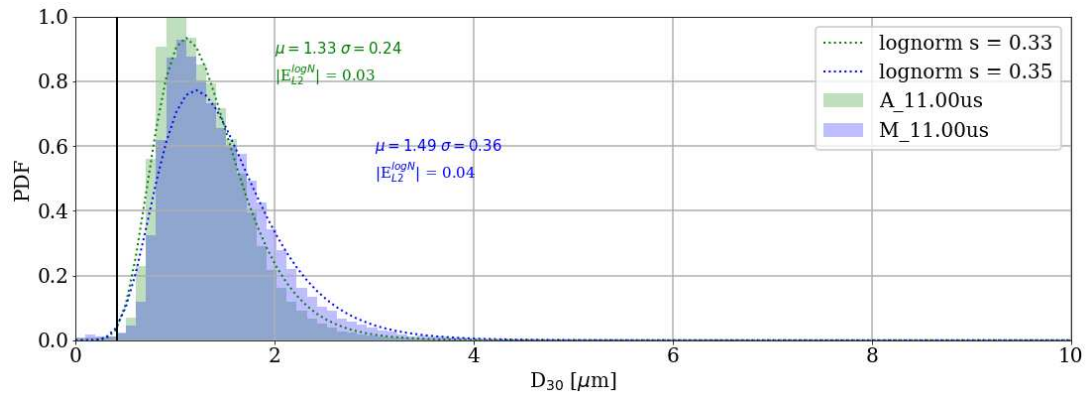


Figura 5.19: Ajuste de histogramas normalizados mediante función log-normal.

determinar si una gota resulta de un proceso de atomización primaria o secundaria, pero sí permite estimar a partir de qué tamaño las gotas dejan de ser estables.

A fin de observar más en detalle la diferencia entre los casos, la Figura 5.19 muestra los histogramas normalizados, ajustados mediante funciones distribución tipo *log-normal*. En este gráfico queda de manifiesto que tanto la moda como la media de la variable D_{30} es menor en el caso A. Los ajustes tienen un error cuadrático medio menor al 4 % y sus media μ son del orden de 3 pasos de malla. La desviación estándar en el caso A es considerablemente menor, dada la gran población de gotas pequeñas.

Complementando este análisis, la Figura 5.20 muestra la distribución acumulativa del volumen de gotas en función de sus diámetros. Esta distribución ha sido normalizada por el volumen total inyectado para comparar cuantitativamente la tasa de atomización en ambos casos. De esta forma se observa que el caso A siempre presenta una mayor atomización, aunque la diferencia varía periódicamente. Para $t = 11\mu s$, las gotas del caso A son el 4.1 % del volumen inyectado, mientras que en el caso M las gotas son sólo 3.75 % del volumen. La diferencia es relativamente reducida (menos del 10 %) y es el caso con mayor We_l es el que posee mayor tasa de atomización. Cabe destacar que ambos casos se encuentran en regímenes con altos números de Weber y Reynolds, y por lo tanto es esperable que la tasa de atomización sea similar.

Respecto al grado de deformación de las gotas, la Figura 5.21 muestra la esfericidad, en ambos casos, con dos normalizaciones: una por volumen y otra por cantidad de gotas. De esta manera, se observa que el 80 % de las gotas tienen una esfericidad superior a 0.8, pero que éstas sólo representan el 35 % del volumen. Por otra parte, la cantidad de estructuras con esfericidad inferior a 0.4 (laminas y filamentos de pequeño espesor) es mínima, pero estas estructuras (las que se desprenden del paraguas en la punta) acumulan el 30 % del volumen atomizado. Si bien la esfericidad no indica la sección mínima del filamento en forma directa, esfericidades bajas implican un mayor

grado de deformación y por lo tanto mayor susceptibilidad a sufrir *breakup* por RTI o PRI.

Respecto a la estabilidad aerodinámica de las gotas, la Figura 5.22 muestra la distribución combinada de diámetros y velocidades de las gotas. Este gráfico permite observar que en el caso A presenta gotas de mayor tamaño relativo, con un D_{30} aproximadamente igual a un tercio del diámetro de inyección en comparación con el caso M cuyas gotas mayores miden un cuarto del diámetro de inyección. Por otra parte, puede observarse que la gran mayoría de las gotas tiene velocidades inferiores a la velocidad de inyección. A su vez, se representan el Re_g y We_g pesados en volumen. De acuerdo a Guildenbecher [54], las gotas con $We_g < 6$ no sufren fragmentación por efectos aerodinámicos. En este contexto, al menos el 87% del volumen de gotas en el caso M es aerodinámicamente estable, mientras que en el caso A este indicador cae a 71 %. Además, puede notarse que las gotas del caso M presentan un Reynolds mayor, es decir, mantienen coherencia en flujos más turbulentos. Estos dos hechos son consecuencia de la mayor tensión superficial en el caso M.

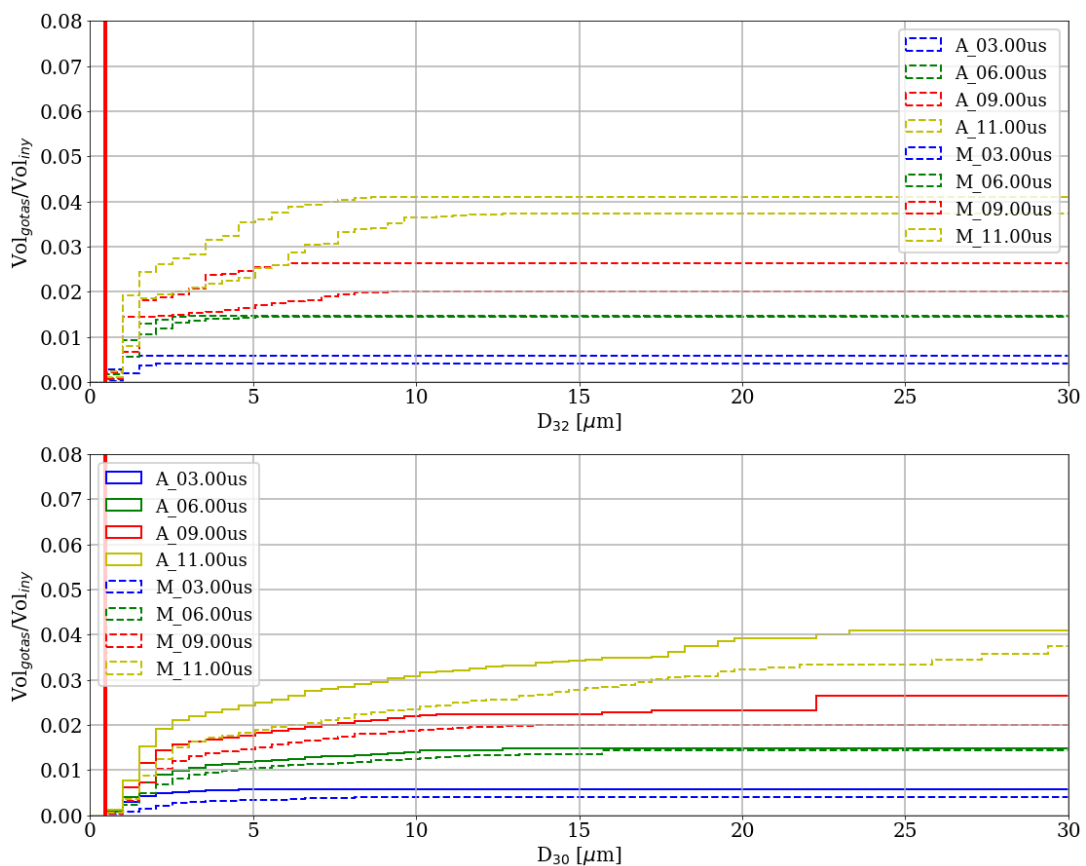


Figura 5.20: Casos pulsantes M y A, distribución acumulativa de volumen en función de D_{30} para $t = 3, 6, 9$ y $11 \mu s$. Rangos de diámetro cada $1 \mu m$.

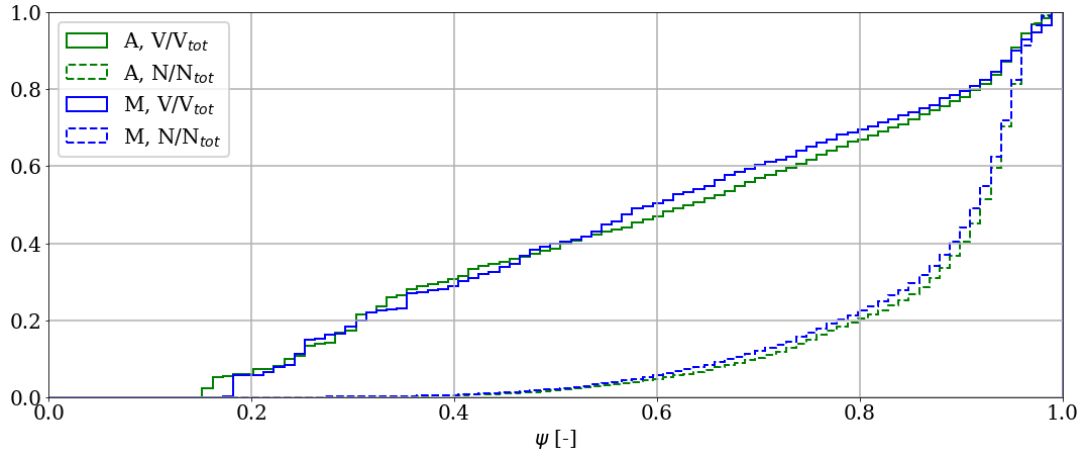


Figura 5.21: Distribución Acumulativa de esfericidad $11\mu s$ normalizada por cantidad de gotas y por volumen.

En cuanto a la evolución global del chorro, la Figura 5.23 muestra el momento lineal total y el de la fase líquida. Debido a la aproximación incompresible, la aceleración de la fase gaseosa es instantánea, provocando la oscilación del aire siguiendo la pulsación de la inyección. Debido a este fenómeno, a los $9\mu s$ la fase gaseosa acumula aún el 30 % del momento total, como puede observarse en el primer cuadro de la Figura 5.23. En el segundo cuadro de la misma imagen puede apreciarse que en ambos casos la punta alcanza una distancia de 1.25 mm en $14\mu s$, marcando el arrastre aerodinámico en la punta del chorro con una reducción del 10 % de la penetración. En este contexto, la relación entre diámetros de cada caso explica la diferencia en la masa inyectada. Finalmente, en el último cuadro se observa que el \overline{D}_{32} del aerosol se reduce aproximadamente al 20 % en los primeros $9\mu s$. Esto es esperable, ya que el período de tiempo simulado no es suficiente para lograr el desprendimiento de la punta del chorro.

Sumario de la variación de parámetros físicos

La comparación anterior permite observar las siguientes diferencias entre casos:

- La tasa de producción de gotas es superior en el caso A, cuyo We_l es mayor, especialmente para gotas pequeñas.
- Aún así, el volumen atomizado en ambos casos es similar (diferencia menor al 10 %).

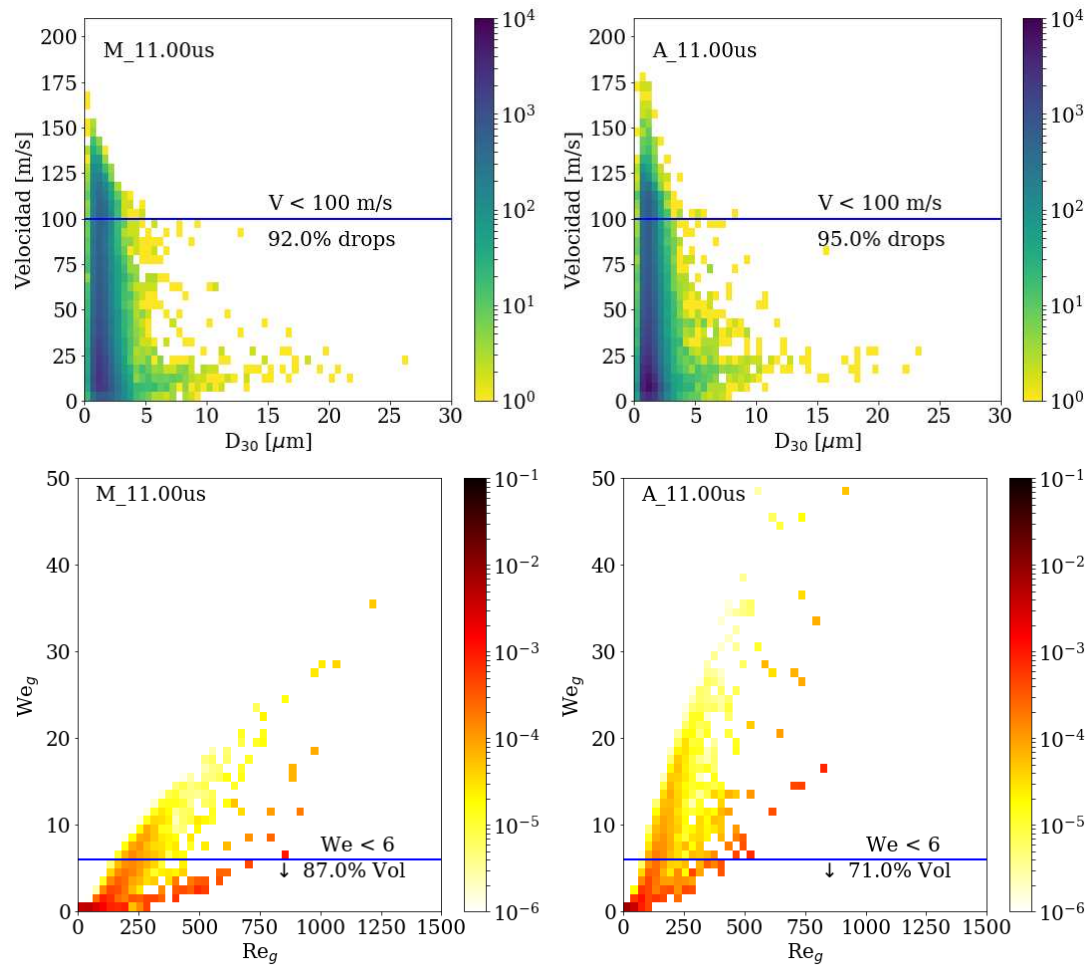


Figura 5.22: Casos pulsantes M y A, histogramas de dos vías. Arriba: cantidad de gotas en rangos de D_{30} - V_d . Abajo: volumen atomizado en rangos de Re_g - We_g . Resultados para $t = 11 \mu s$.

- Si bien se generan estructuras con diámetro equivalente en volumen (D_{30}) de casi $30 \mu m$, el máximo Diámetro de Sauter (D_{32}) reportado en las gotas es de $10 \mu m$.
- A su vez, la distribución de esfericidad muestra que las estructuras líquidas desprendidas se encuentran significativamente deformadas, siendo las de mayor volumen láminas o ligamentos.
- El volumen de gotas susceptible a sufrir atomización secundaria aerodinámica es casi el doble en el caso A.

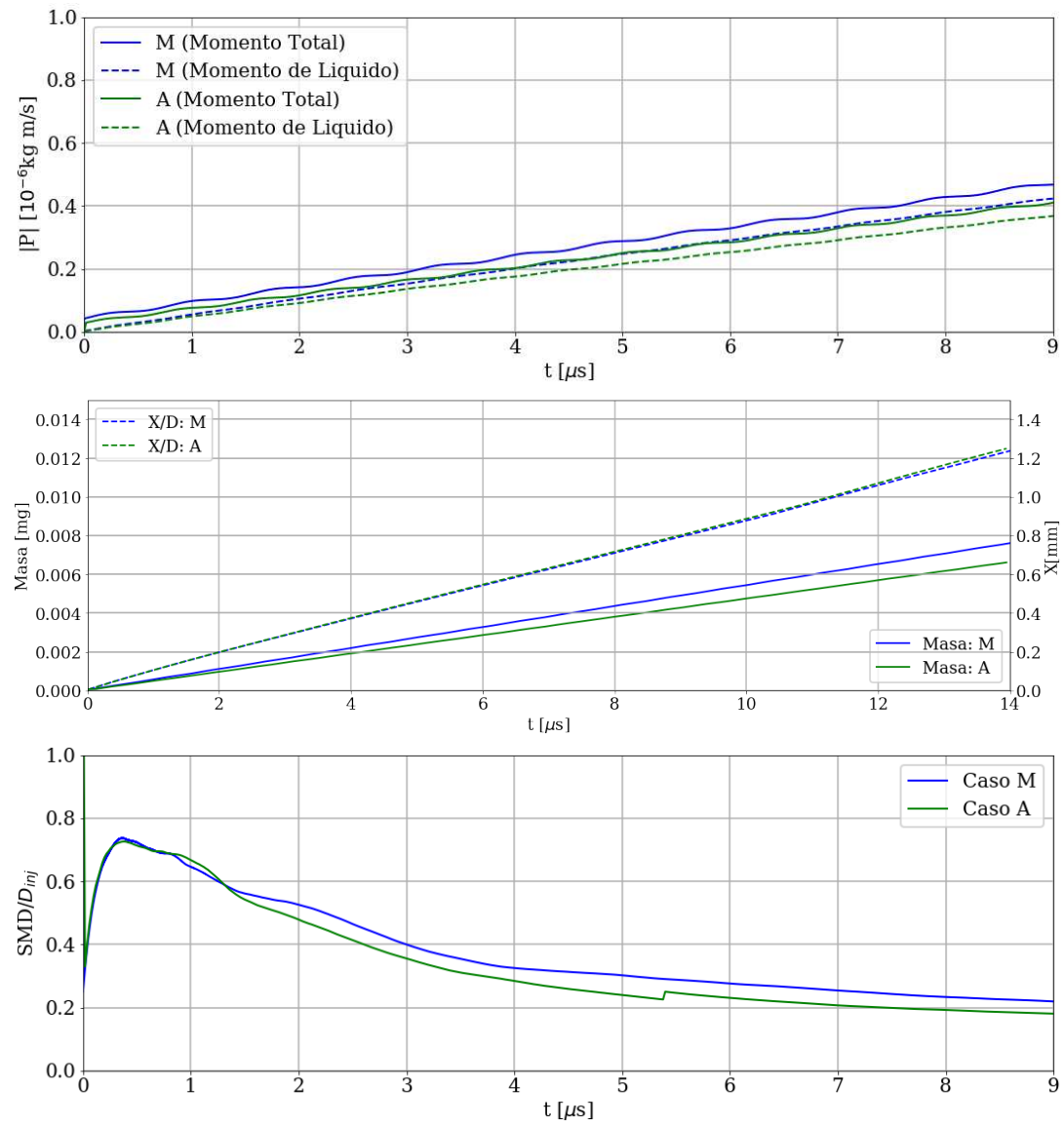


Figura 5.23: Casos pulsantes M y A, evolución temporal de variables globales del *spray*. De arriba hacia abajo, momento lineal, penetración y masa líquida inyectada, Diámetro Medio de Sauter ($SMD = \overline{D_{32}}$)

Remark: A nivel general, no se han observado grandes diferencias en la dinámica de atomización primaria. Sin embargo, el caso A parece más susceptible a sufrir procesos de atomización secundaria. Esto explica que los diámetros característicos del aerosol A sean menores.

Remark: A nivel general, no se han observado grandes diferencias en la dinámica de atomización primaria. Sin embargo, el caso A parece más susceptible a sufrir procesos de atomización secundaria. Esto explica que los diámetros característicos del aerosol A sean menores.

5.5.3. Estudio de convergencia en malla

Como se mencionó al comienzo del capítulo, todas las simulaciones emplean el mismo criterio de refinamiento,

$$w(\mathbf{u}) < 1\text{m/s} \quad \wedge \quad w(\tilde{c}) < 10^{-3} \quad \wedge \quad \frac{h}{\eta} < 10. \quad (5.7)$$

donde la función w corresponde a la aproximación discreta de *wavelet* definida como se indicó en la Ecuación (4.112).

Ling *et. al.* [92] reportan que las escalas disipativas de turbulencia no tienen energía suficiente para inducir un proceso de atomización, por lo que la fragmentación se ve mayormente afectada por las grandes escalas de flujo. Por lo tanto se opta por relajar la condición de refinamiento por turbulencia, filtrando las escalas disipativas de turbulencia en las regiones donde no se activen los otros criterios de refinamiento.

De cualquier manera, el desarrollo de la capa límite a partir del chorro induce siempre el refinamiento máximo en la región adyacente a la interfase debido a la restricción del *wavelet* de velocidad. Aún empleando el máximo nivel de refinamiento no se alcanza la tolerancia de *wavelet* preestablecida. Concretamente, para el caso $h = 0,48\mu\text{m}$, el *wavelet* de velocidad alcanza valores de 60m/s en la celda de interfase. No obstante, este defecto se halla localizado exclusivamente en las celdas VOF mixtas, donde la discontinuidad hace que la aproximación del error mediante *wavelets* pierda validez. En este contexto, es ilustrativo observar la Figura 5.24 donde se representa la evolución temporal de algunos indicadores de error. Asimismo, se muestran en la Figura 5.25 los indicadores de error, en escalas que permiten caracterizar las zonas de capa límite.

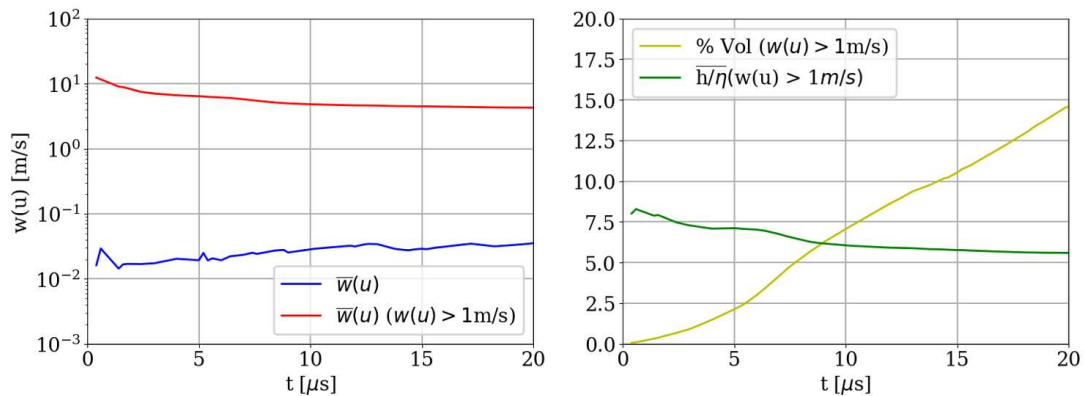


Figura 5.24: Caso M ($h = 1.4 \mu\text{m}$), evolución temporal de wavelets medios (izquierda) y estadísticas de la región fuera de rango (derecha).

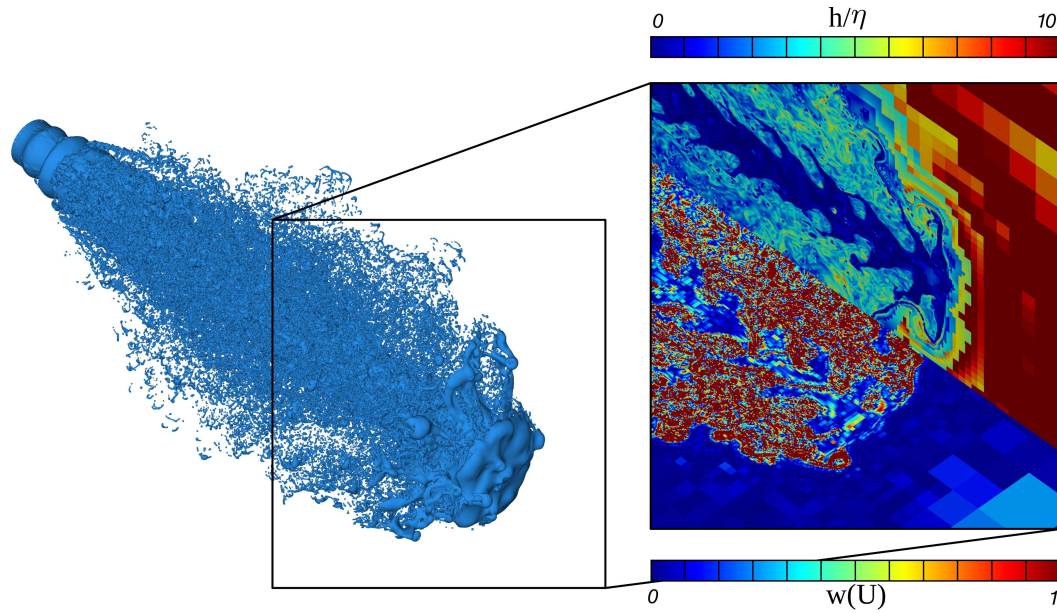


Figura 5.25: Caso M ($h = 1.42 \mu\text{m}$, $t = 15 \mu\text{s}$). Representación de wavelets (vista planta) y proporción h/η (vista lateral) en los planos de simetría del dominio

Varias observaciones pueden hacerse sobre estas imágenes. Por un lado, el dominio en general logra niveles de error de velocidad considerablemente reducidos con un paso de malla grueso ($\approx 4\mu\text{m}$). Sin embargo, en toda la región cercana a la superficie libre el wavelet supera el umbral prefijado. Así, a medida que el chorro penetra en el dominio aumenta el volumen de la capa límite y por lo tanto el error numérico se concentra en una región que es el 15% del volumen ($t = 20 \mu\text{s}$). Más allá de este inconveniente, el error medio global estimado es bajo, ya que en las regiones lejanas al chorro el indicador de error es prácticamente nulo. Más aún, el valor de error estimado se mantiene debajo del 10% de la velocidad de inyección.

Respecto al filtro que la malla aplica sobre la turbulencia, puede observarse que las regiones con mayor $w(\mathbf{u})$ se encuentran dentro del rango tolerado (y aún por debajo de lo estipulado). Así, se verifica que los criterios de refinamiento son complementarios y que, si bien el error numérico no está acotado dentro del rango objetivo, la disipación de energía cinética en la capa límite se encuentra dentro de los rangos esperados (10^{12}), de acuerdo a las estimaciones de escalas de Kolmogorov en la Ecuación (5.8).

Estimación de escalas características de flujo

Habiendo descripto los mecanismos de atomización y el efecto de la turbulencia sobre los mismos, esta sección busca analizar las escalas características de cada fenómeno. Una estimación *a priori* del paso de malla requerido para resolver todas las

escalas del flujo mediante DNS puede realizarse en base a la escalas de Kolmogorov y Hinze,

$$\eta = \frac{D_{inj}}{Re^{3/4}} \quad \varepsilon = \frac{v^3}{\eta^4} \quad \zeta = 0,75 \left(\frac{\sigma}{\rho_g} \right)^{3/5} \left(\frac{\varepsilon}{\rho_g} \right)^{-2/5} \quad (5.8)$$

donde la escala de Hinze (ζ) [76] corresponde al diámetro de gota estable frente a las fluctuaciones turbulentas de presión. Cabe destacar que en los problemas donde se desarrolla una capa de mezcla, el tamaño medio de gotas suele ser considerablemente menor a ζ [92]. Por lo tanto, estos valores son útiles para conocer el nivel de resolución de escalas turbulentas y un valor máximo diámetro estable de gota.

Por otra parte, en la sección anterior se describieron los mecanismos de deformación y fragmentación que definen las escalas más pequeñas de la interfase. Por un lado, la deformación inicial del chorro se encuentra dominada por fenómenos aerodinámicos (dados los elevados valores de We y Re).

Tomando como punto de partida la evolución de una KHI sobre una interfase plana, dada por una función perturbación $h(t, \mathbf{x})$, la tasa de crecimiento en función del número de onda, $\gamma(k)$, aproximada por teoría de estabilidad lineal para flujo no viscoso en una capa de mezcla [174] es,

$$\omega(k) = \left[\frac{\rho_g \rho_l (\Delta U)^2}{(\rho_g + \rho_l)^2} k^2 - \frac{\sigma}{(\rho_g + \rho_l)} k^3 \right]^{1/2} \longrightarrow \lambda_c = 2\pi \frac{(\rho_g + \rho_l) \sigma}{\rho_g \rho_l (\Delta U)^2}. \quad (5.9)$$

donde se considera que la perturbación es una senoide en el sentido x . La longitud de onda crítica (λ_c) es la mínima longitud de onda para la cual la perturbación crece y por lo tanto las perturbaciones con $\lambda < \lambda_c$ se mantendrán estables. En el contexto de flujo invíscido ($Re = \infty$), la longitud de onda con máxima tasa de crecimiento ($\lambda_m = 3\lambda_c/2$). Es esperable que esta longitud se encuentre asociada a las estructuras líquidas producidas en la atomización primaria.

Por otra parte, los mecanismos de fragmentación también se ven afectados por inestabilidades de onda corta [139, 157, 37]. A medida que las láminas y filamentos reducen su espesor y velocidad, las perturbaciones evolucionan como una inestabilidad de Rayleigh-Taylor (láminas) o Plateau-Rayleigh (filamentos). En ambos casos, el *breakup* ocurre por una reducción de la sección hasta que las superficies opuestas de la estructura líquida entran en contacto. En dicho proceso, la región con el menor espesor desarrolla curvaturas negativas de gran magnitud que aceleran el proceso de *pinch-off* [38]. Según el análisis lineal de Senecal *et. al.* [157], la longitud de onda con mayor

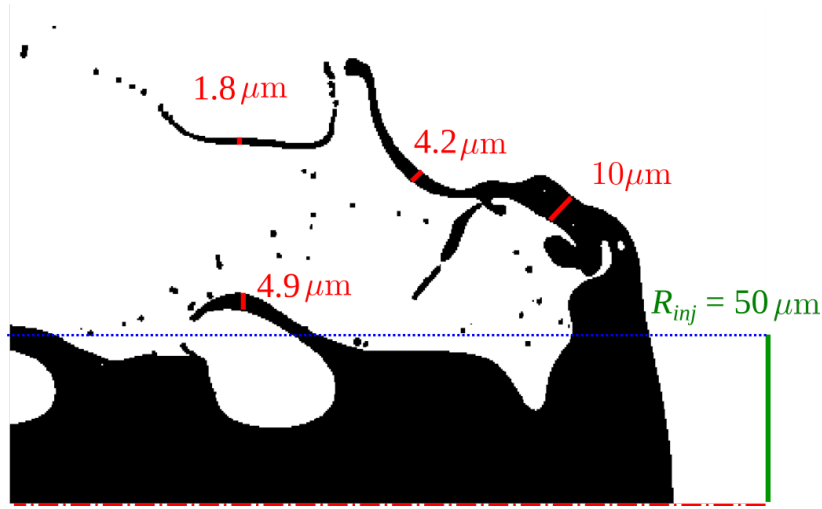


Figura 5.26: Campo VOF con medición de espesor en lámina para el caso MPF.

tasa de crecimiento está dada por la expresión,

$$k_s = \frac{\rho_g (\Delta U)^2}{2\sigma} \rightarrow \lambda_s = \frac{4\sigma\pi}{\rho_g (\Delta U)^2}. \quad (5.10)$$

Esta magnitud permite también estimar el diámetro de los ligamentos en función del espesor inicial (e_0) de la lámina y el diámetro de las gotas que se formarán al fragmentarse el ligamento.

$$D_{lig} = \sqrt{\frac{8e_0}{k_s}} \rightarrow D_{drop} = 1,88 D_{lig} (1 + 3Z)^{1/6}, \quad (5.11)$$

donde se considera que la fragmentación en gotas sucede a baja velocidad y está gobernada por inestabilidades capilares. El espesor inicial de la lámina dependerá, por supuesto, del problema en cuestión. Para el caso particular MPF, la figura 5.26 muestra un corte lateral del campo VOF que permite medir el espesor de algunas láminas formadas en la punta del chorro. Puede notarse que a medida que la lámina se aleja de la punta su espesor se reduce, formando *films* de menos de $2\mu\text{m}$ de espesor.

Tomando este valor como referencia, puede completarse la siguiente tabla de longitudes características.

Por limitaciones de costo computacional, el menor paso de malla empleado es $h = 0,48\mu\text{m}$ ¹. Si bien es insuficiente para representar todas las estructuras líquidas

¹A modo de ejemplo, la simulación de $13\mu\text{s}$ del problema de Ménard con paso de malla $h = 0,48\mu\text{m}$ requiere más de 40 000 horas núcleo. La malla ($t = 12\mu\text{s}$) se compone de más de 5×10^8 (500 millones) de celdas, precisando 50 GB de memoria para almacenar la malla y los campos de interés (\tilde{c} , \mathbf{u} , aceleración y *wavelets*).

Parámetro	caso M	caso A
$\eta_g [\mu m]$	0.078	0.084
$\eta_l [\mu m]$	0.131	0.154
$\zeta [\mu m]$	9.71	5.90
$\lambda_c^{KH} [\mu m]$	1.56	0.72
$\lambda_s [\mu m]$	3.01	1.39
$D_{lig} [\mu m]$	2.69	1.88

Cuadro 5.4: Resumen de escalas características en los problemas estudiados.

presentes en el *spray*, es equivalente a las simulaciones de mayor precisión en la bibliografía [159] y considerablemente más refinada que el resto de los casos que analizan chorros en estas condiciones de inyección [151, 94].

De esta manera, como puede observarse en la Tabla 5.4, las escalas relacionadas con fenómenos de interfase son, *a priori*, un orden de magnitud mayor que la escala disipativa de turbulencia.

Análisis de resultados

La comparación de histogramas en la Figura 5.27 muestra que la simulación con mayor refinamiento desarrolla una distribución con una cantidad de gotas varios órdenes de magnitud superior a los casos gruesos, especialmente para los diámetros pequeños. Para $t = 11.80 \mu s$, por ejemplo, el caso con paso de malla de $0.48 \mu s$ dispone de más de 74 mil gotas, de las cuales más de 50 mil tienen un diámetro inferior a $2 \mu m$. Esto es una muestra de que efectivamente, el paso de malla influye significativamente en la población de gotas. Por otra parte, la Figura 5.28 muestra ajustes mediante distribuciones *log-normales* PDF para cada malla. Es notable que las medias y modas de las distribuciones para los casos más finos son aproximadamente iguales a $3h$. Esto parece indicar que no se ha alcanzado aún la resolución adecuada para caracterizar la tasa de atomización, a pesar de que el paso de mala empleado permite representar las longitudes de onda críticas con 4 celdas.

Cabe también notar que la distribución de malla más gruesa es la que presenta más gotas de diámetro medio ($5 \mu m < D_{30} < 10 \mu m$), mientras que diámetros aún mayores aparecen más rápidamente en la simulación refinada (Figura 5.28). Esto puede explicarse por dos fenómenos numéricos. En primer lugar, todas las perforaciones que se producen en una lámina son producto de la falta de resolución. Es decir, las interfases a cada lado de la lámina se mantienen independientes hasta que llegan a una misma celda. En ese instante, la representación PLIC asigna un único plano en la celda, unificando las interfases y creando la perforación. Esto explica también el

hecho de que la malla gruesa presente desprendimientos más frecuentes de estructuras relativamente grandes, logrando un volumen de atomización considerablemente

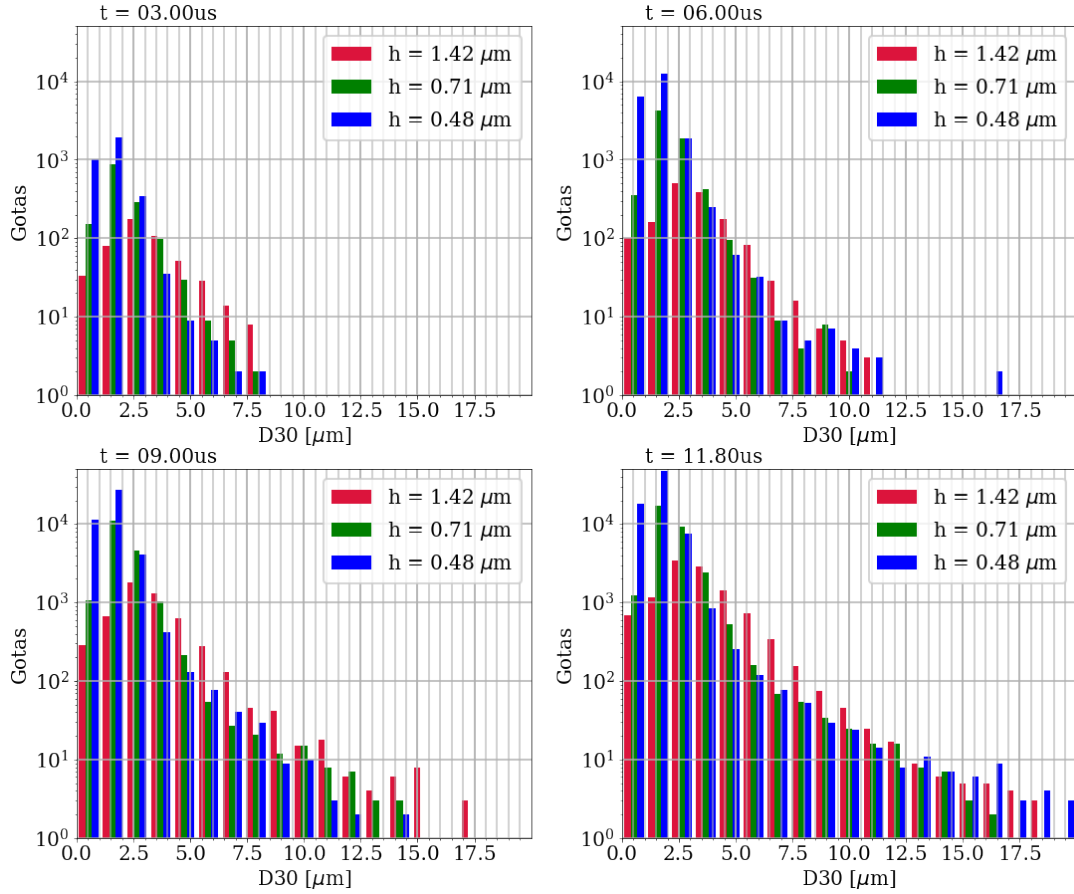


Figura 5.27: Caso M, convergencia en malla: histograma comparativo de cantidad de gotas. Poblaciones agrupadas cada $1\mu\text{m}$

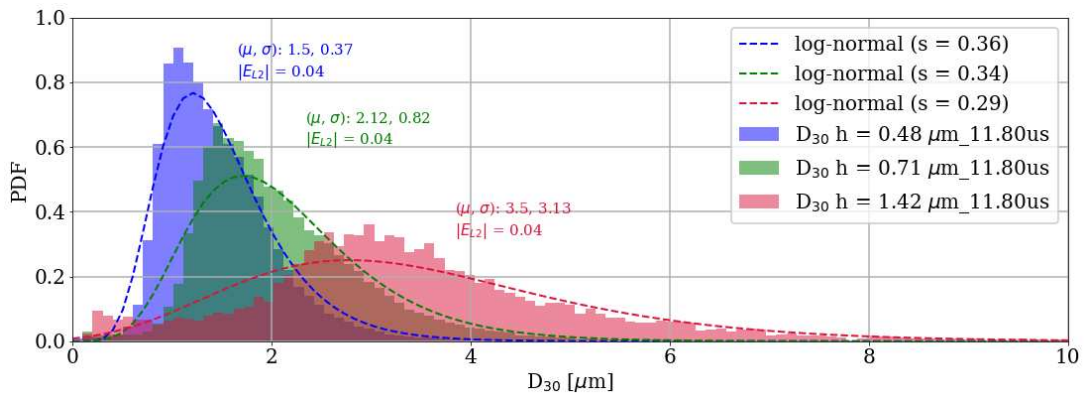


Figura 5.28: Caso M, convergencia en malla: distribuciones normalizadas para $t = 12\mu\text{s}$, ajuste por PDF log-normal.

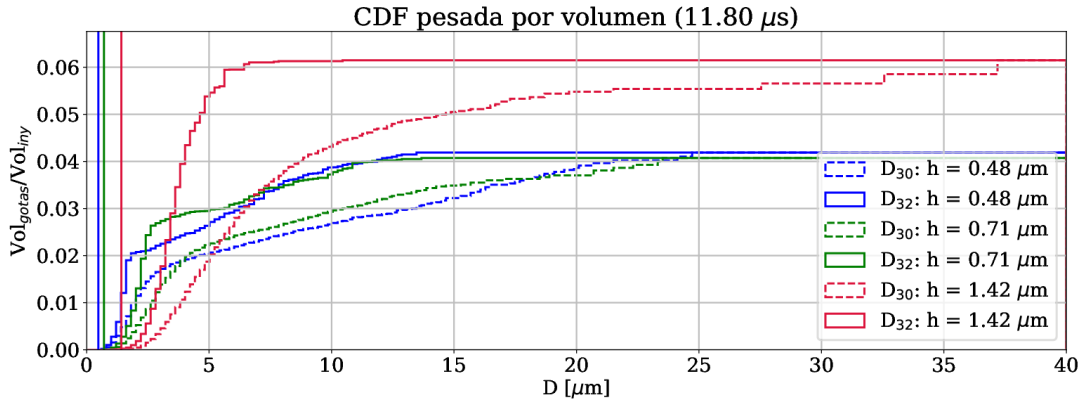


Figura 5.29: Caso M, convergencia en malla: distribución acumulativa en volumen

superior, como puede observarse en la distribución acumulativa de la Figura 5.29. Otra diferencia importante a observar en esta gráfica es que los D_{32} de la simulación gruesa son considerablemente menores, denotando que la falta de resolución de la malla implica también una sub-estimación de la superficie de cada gota.

En cuanto al grado de deformación de las gotas, la Figura 5.30 muestra la esfericidad ψ . Para los casos MPM y MPF, aproximadamente el 80 % de las gotas son prácticamente esféricas, pero las estructuras líquidas restantes acumulan el 65 % del volumen atomizado. Se corrobora así que en ambas simulaciones las estructuras de mayor tamaño son láminas y filamentos con alto grado de deformación.

La evolución temporal de los histogramas pesados por volumen, dada en la Figura 5.31, permite identificar más rápidamente los rangos de diámetros en los que la atomización se ve afectada. Por un lado, es claro que la malla gruesa, al inducir *breakup*

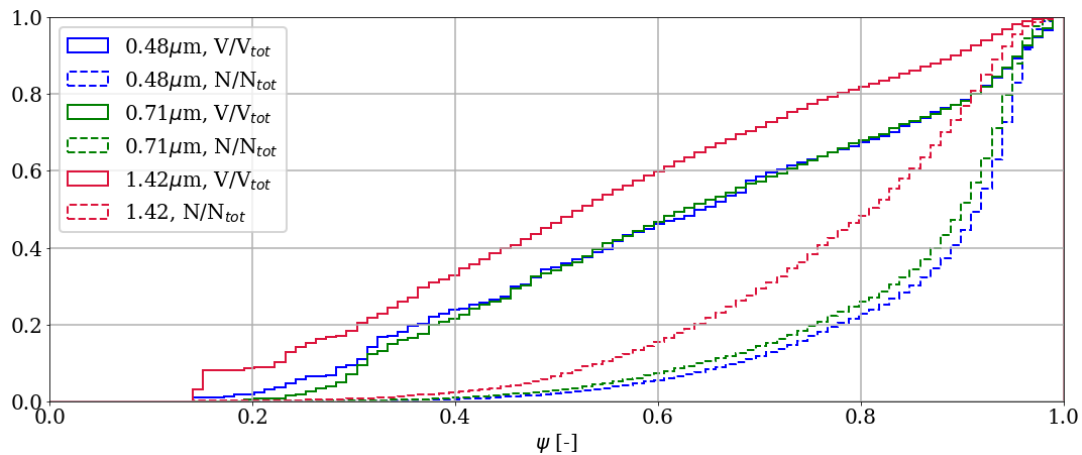


Figura 5.30: Caso M, convergencia en malla: esfericidad de gotas

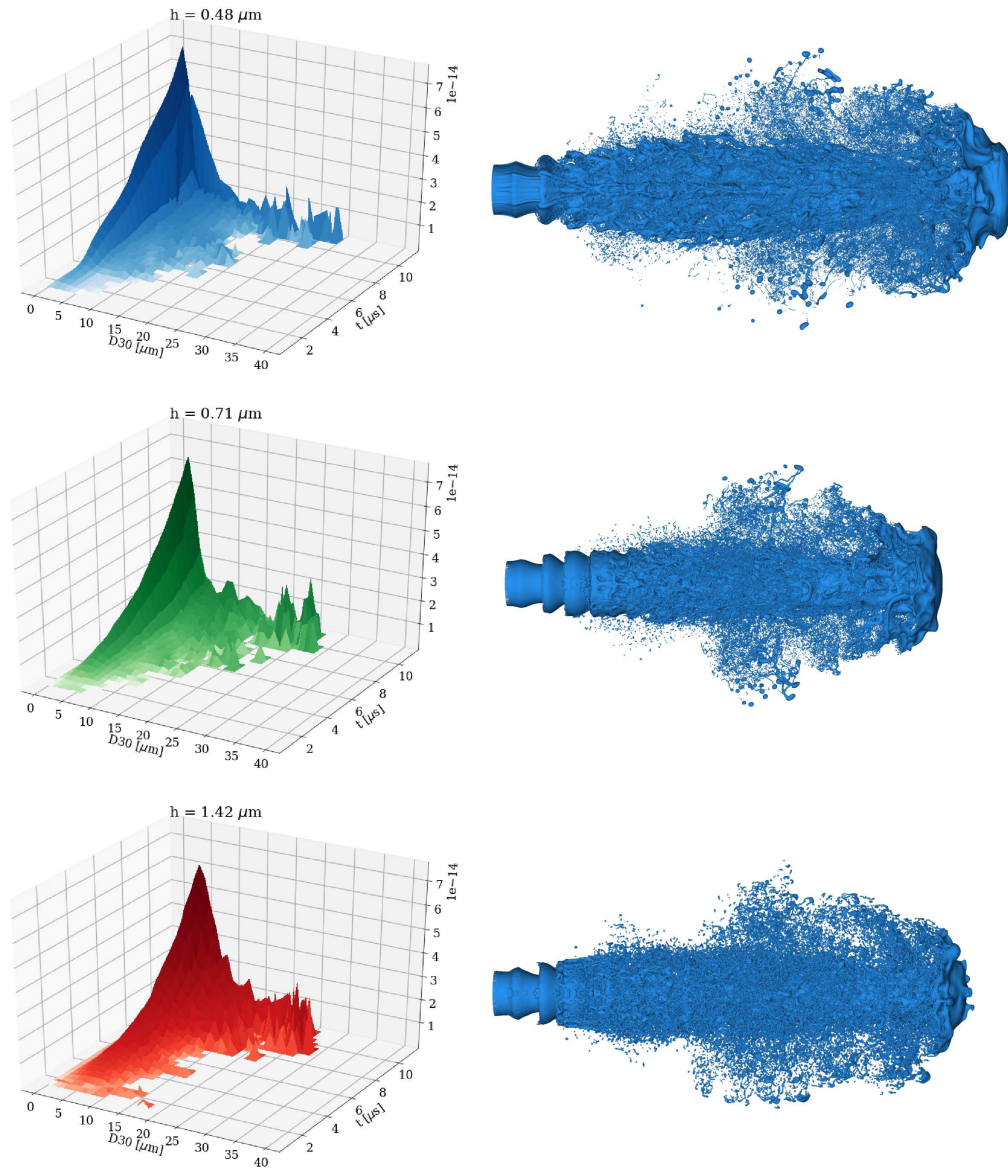


Figura 5.31: Caso M, convergencia en malla: evolución temporal de los histogramas pesados por volumen.

espurio por falta de resolución, desprende las láminas de la punta más rápidamente. A su vez, las gotas de menor tamaño son considerablemente más abundantes en el caso fino, conteniendo para el rango $D_{30} \in [1 - 2] \mu\text{m}$ 20% más del volumen que el caso grueso.

A partir de los datos en los histogramas anteriores puede computarse la evolución temporal del volumen total atomizado, como se muestra en la Figura 5.32. En esta representación es más sencillo cuantificar la variación de la tasa de atomización en función de la resolución de malla. Para este caso particular, puede observarse que el

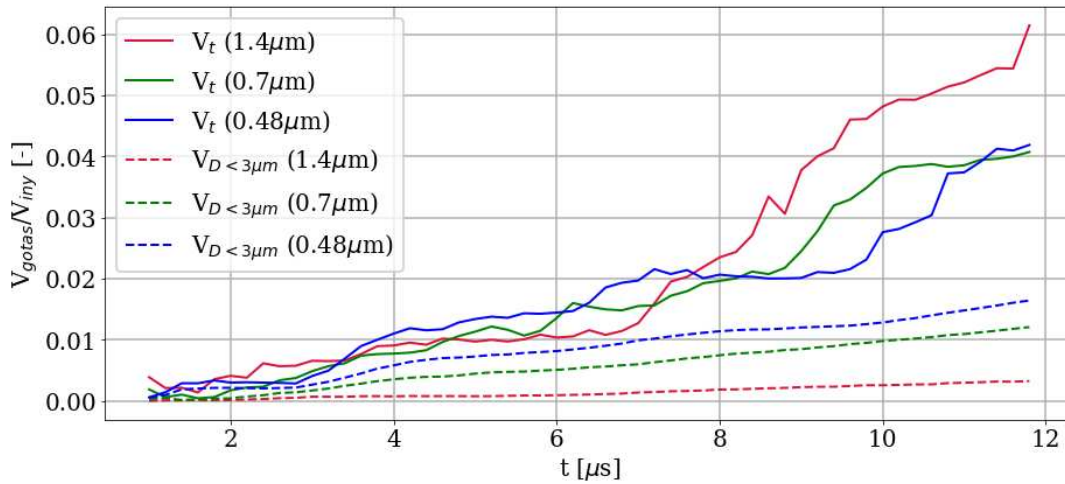


Figura 5.32: Evolución temporal de volumen atomizado total (V_t) y en gotas de diámetro menor a $3\mu\text{m}$.

caso más refinado presenta mayor atomización al comienzo (debido al desprendimiento rápido de gotas pequeñas) pero a medida que transcurre el tiempo, se desarrollan las inestabilidades de mayor tamaño que en el caso grueso se desprenden más rápidamente, generando un cambio de pendiente abrupto para $t = 7\mu\text{s}$. A su vez, se representa el volumen de las gotas más pequeñas ($D_{30} < 3\mu\text{m}$). Este rango es casi el 50% del volumen atomizado total en el caso MPF mientras que en MPG no alcanza el 10%.

Una comparación más precisa puede realizarse entre MPM y MPF mediante la Figura 5.33, donde se grafica la proporción en volumen de cada rango de gotas y su evolución en el tiempo. Estas gráficas muestran que el volumen de gotas no resueltas ($D < 4h$) es de orden 30% en ambos casos. Sin embargo, el caso MPF muestra una tendencia descendente mientras que MPM presenta oscilaciones más marcadas.

Por otra parte, los histogramas de dos vías en la Figura 5.34 permiten observar que las gotas de gran tamaño se mantienen siempre a bajas velocidades. En el mismo esquema puede apreciarse que a medida que se reduce el paso de malla se generan gotas más pequeñas que se mueven a mayor velocidad. Si bien estas gotas alcanzan velocidades considerablemente superiores a la velocidad de inyección ($V_d > 180\text{ m/s}$), los diámetros de estas estructuras son mínimos y por lo tanto se mantendrán estables. De hecho, como puede apreciarse en la Figura 5.7, estas gotas se localizan en la región posterior de la punta del jet, con lo cual podría ser el arrastre provocado por los vórtices en esa región que acelere las gotas. Otro punto destacable en estos diagramas es que a medida que el nivel de refinamiento se incrementa, el porcentaje de volumen estable (bajo We_g y bajo Re_g) es superior. Esta característica puede explicarse también por el efecto numérico que la falta de resolución tiene sobre el *breakup*: al retardar el

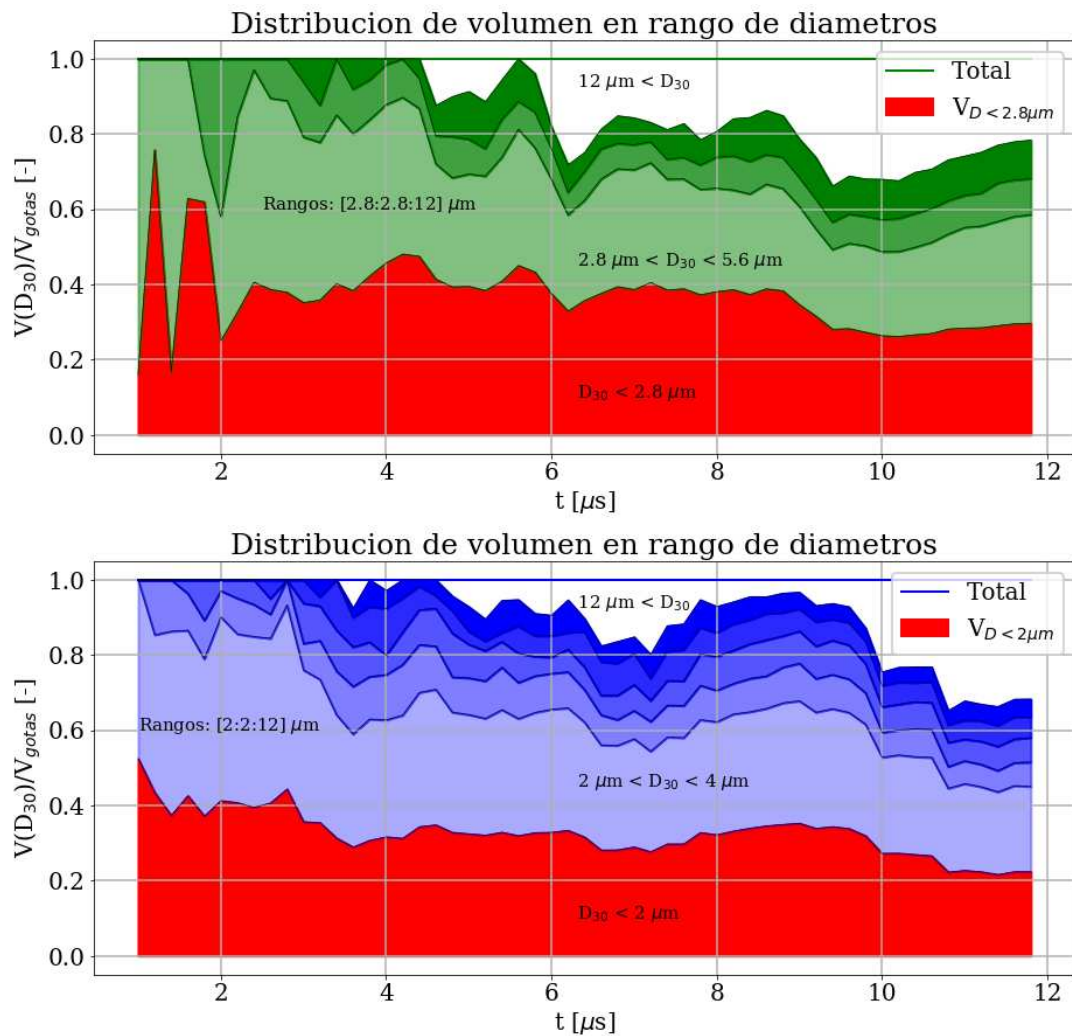


Figura 5.33: Proporción de gotas correctamente resueltas en casos MPM y MPF.

desprendimiento de las estructuras en la punta del chorro, los ligamentos sufren el arrastre aerodinámico por más tiempo. Esto implica que su velocidad de eyección es menor y por lo tanto se encuentran en una condición de flujo más estable.

Relación entre escalas características y paso de malla

Las simulaciones analizadas dan indicios de que aún no se ha alcanzado una resolución de malla suficiente para representar todas las escalas de atomización. Esta sección busca comprender con mayor detalle cuáles son los factores que introducen factor numérico, a fin de establecer un paso de malla que represente los fenómenos de fragmentación.

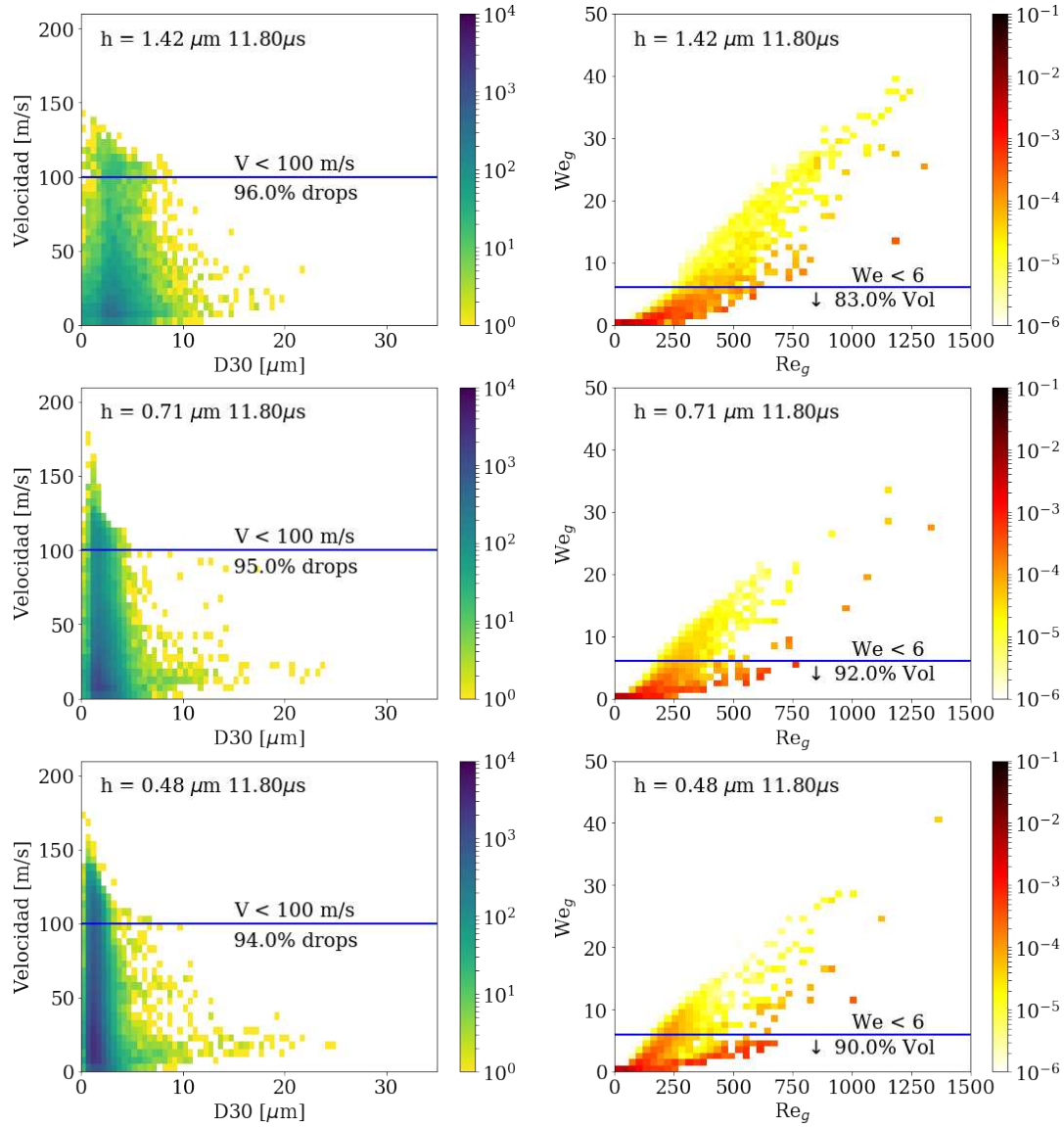


Figura 5.34: Caso M, convergencia en malla: histogramas de dos vías, caracterización de la nube

Retomando la teoría de estabilidad lineal, puede estimarse el tiempo de *breakup* considerando una tasa de crecimiento $\gamma(k)$ constante,

$$t_{bu} = \frac{1}{\gamma(k)} \ln \left(\frac{e_0}{e_{bu}} \right) \quad (5.12)$$

donde e_0 es el espesor inicial de la lámina y e_{bu} es la distancia a la cual se produce la fragmentación. Si bien la evolución real de las inestabilidades no presenta un $\gamma(k)$ constante, debido a los efectos no lineales, es claro que el tiempo de fragmentación

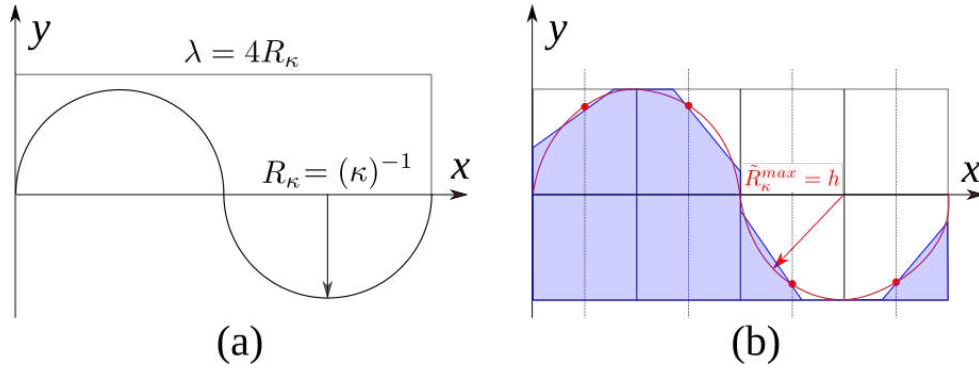


Figura 5.35: Onda construida mediante dos arcos de circunferencia (a) y representación VOF-PLIC con ajuste parabólico de curvatura (b)

dependerá fuertemente del valor k , que en las simulaciones se encuentra representado por la curvatura de la interfase κ .

Por lo tanto, lograr una buena representación de la interfase y su curvatura es crucial para capturar correctamente los tiempos de deformación y fragmentación. En este contexto, una manera de estimar la longitud de onda en la superficie libre es considerar el radio de curvatura local R_κ . Si bien una onda sinusoidal tiene curvatura variable, una aproximación simplificada puede obtenerse mediante dos semicircunferencias como se muestra en la figura 5.35 (a). En este caso, la longitud de onda es $\lambda = 4R_\kappa$. La Figura 5.35 (b) muestra una representación PLIC de esta onda, donde la curva roja corresponde a un posible ajuste (óptimo) por *splines* parabólicos empleado en el cálculo de la curvatura [133], descrito en la sección 4.5. Este ejemplo muestra el límite mínimo de resolución, ya que el máximo radio de curvatura que puede representado en la malla corresponde al paso local $\tilde{R}_\kappa \leq h$. Por lo tanto, un posible criterio para considerar que todas las inestabilidades se encuentran correctamente representadas es $\kappa(\mathbf{x}) < [h(\mathbf{x})]^{-1}$.

Así, el límite máximo del paso de malla estará dado por $h < R_\kappa$. Algunos autores sugieren un rango más conservador, procurando una relación de diez celdas por longitud de onda [92], $2,5h < R_\kappa$. En este contexto, se propone emplear como indicador de la calidad de malla al cociente h/R_κ . Puede considerarse que una simulación representa todas las escalas de interfase si $h/R_\kappa < 1$ en todas las celdas.

Por otra parte, la fragmentación en el contexto de los métodos numéricos ocurre siempre por una falta de resolución de malla. Para comprender mejor este fenómeno, la Figura 5.36 muestra la evolución de una lámina líquida cuyos extremos se desplazan con velocidad u_0 en sentidos opuestos, elongando la lámina hasta perforarla. Los parámetros físicos de ambas simulaciones son idénticos, la única diferencia en la configuración es el máximo nivel de refinamiento permitido. Así, este ejemplo

permite observar cómo un mayor refinamiento extiende el tiempo de fragmentación: la malla gruesa presenta espesores menores a una celda para $t^* = 1,1$ mientras que esta condición se alcanza en el caso refinado aproximadamente para $t^* = 2,1$. Más aún, alcanzado el límite de espesor $e = 2h$ se observa que los planos PLIC pierden estabilidad, porque la proximidad de interfaces opuestas introduce error en el cálculo de las normales de Youngs. Por lo tanto, puede asegurarse que las estructuras coherentes con espesor inferior a dos pasos no serán representadas correctamente.

En el contexto de los problemas de atomización primaria resueltos, la fragmentación en la punta del chorro se ve fuertemente afectada por esta problemática. Si la perforación por RTI de las láminas en el frente sucede antes del tiempo físico correspondiente, el volumen de los ligamentos desprendidos será erróneo debido al error numérico. En este proceso, los *films* alcanzan espesores muy reducidos, exigiendo una alta resolución para ser correctamente representados.

Por otra parte, cuando la resolución de malla en una celda con interfase no es suficientemente pequeña para representar el radio de curvatura, el valor de κ predicho

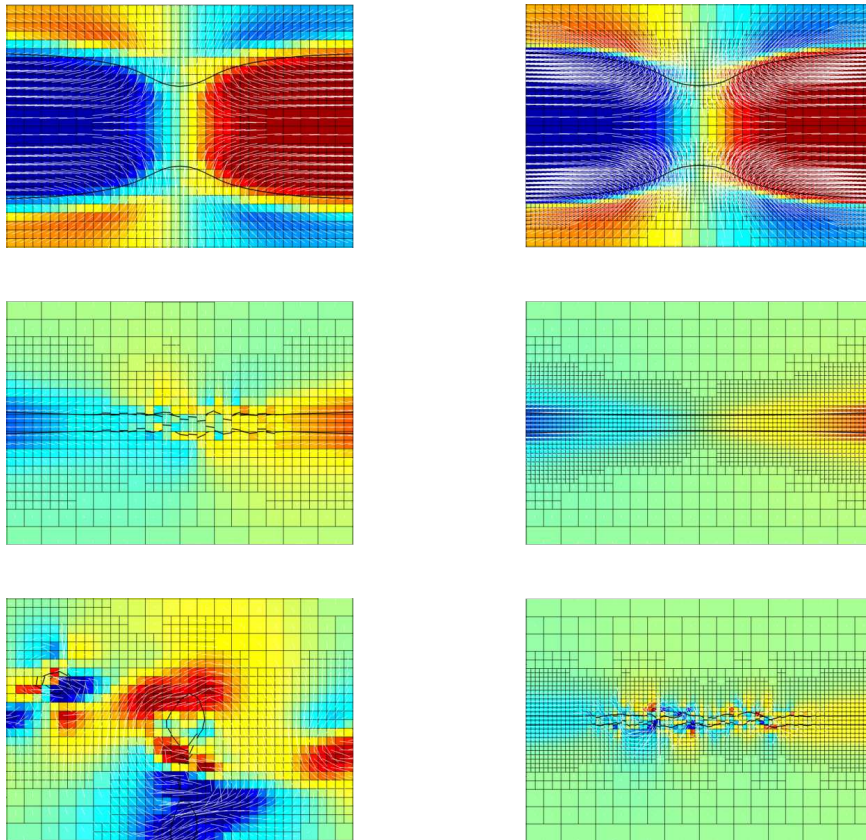


Figura 5.36: Elongación de lámina 2D resuelta con dos niveles de refinamiento. Fotografías para tiempos adimensionales $t^* = (0,1; 1,1; 2,2)$

mediante *splines* parabólicos es superior al real. Esto implica que las estructuras tendrán “coherencia numérica”, es decir, debido a la falta de resolución no sufrirán más fragmentación.

A partir del análisis de estabilidad lineal, puede estimarse cuánto error se introduce en el tiempo de perforación de una lámina líquida por emplear un paso de malla excesivamente grande. Considerando que el *breakup* numérico comienza cuando el espesor es igual a dos pasos de malla y que $\omega(k) = \text{cte}$,

$$t_{bu} = \frac{1}{\gamma(k)} \ln \left(\frac{e_0}{e_{bu}} \right) \rightarrow \frac{t_{bu} - t_{num}}{t_{bu}} = - \frac{\ln(2h/e_{bu})}{\ln(e_0/e_{bu})}. \quad (5.13)$$

De esta manera, el error numérico en el tiempo de breakup será nulo sólo si $h \leq e_{bu}/2$. Para el caso de filamentos, por ejemplo, Dumouchel *et. al.* [37] proponen considerar $e_{bu} = 0,05e_0$. En el contexto de la simulación MPF, dada la lámina con $e_0 \approx 2\mu\text{m}$, el paso de malla requerido sería $h \leq 0,05\mu\text{m}$, un décimo del paso de malla empleado. Considerando el paso $h = 0,48\mu\text{m}$ utilizado, el error numérico en el tiempo de *breakup* según la Ecuación (5.13) será $(t_{bu} - t_{num}) \approx 0,76t_{bu}$. Para $h = 0,71\mu\text{m}$, en cambio $(t_{bu} - t_{num}) \approx 0,89t_{bu}$. El paso $h = 1,42\mu\text{m}$ no permite siquiera representar el espesor inicial supuesto.

El fenómeno de fragmentación numérica explica también el hecho de que las mallas más gruesas produzcan una atomización más rápida (porque los t_{num} son menores) y con estructuras líquidas de mayor tamaño (debido a que no pueden representarse gotas con longitudes menores a $2h$).

Debido a esto, es esperable que agregar otro grado de refinamiento provoque un nuevo corrimiento a la izquierda de la PDF (Figura 5.28). Es decir, es esperable que una simulación más refinada presente un diámetro medio menor y tiempos de fragmentación más extensos.

Sumario de resultados para el análisis de convergencia en malla

Los resultados obtenidos indican que a pesar de utilizar un paso de malla acorde para capturar la mayoría de las escalas características de los fenómenos de interfase aún no se ha alcanzado la resolución suficiente para representar los procesos de fragmentación.

Si bien las simulaciones de mayor resolución presentan distribuciones de diámetro en rangos similares y con el mismo nivel de deformación (Figuras 5.29 y 5.30), los valores medios de D_{30} se mantienen en los límites de resolución de la malla ($\overline{D}_{30} \approx 3h$).

No obstante, se observa un comportamiento similar en todos los casos simulados. Como principales diferencias cabe destacar que:

- El diámetro moda es también, en todos los casos, del orden de 3 pasos de malla. Aplicar casi dos niveles de refinamiento extra incrementan la cantidad de gotas casi en un orden de magnitud. Esto se debe a una representación más precisa de las inestabilidades de menor longitud de onda.
- El caso más grueso, MPG, presenta un mayor volumen atomizado, acumulado en gotas de gran tamaño. Asimismo, la tasa de atomización es mayor que en los otros casos. Esto se explica en el análisis realizado sobre la fragmentación numérica.
- Los casos MPM y MPF presentan niveles de deformación (ψ) similares, donde más del 60 % del volumen se concentra en estructuras con un alto grado de deformación.
- Los números adimensionales de las gotas en el aerosol presentan tendencias similares. Más del 80 % del volumen atomizado se encuentra en una condición aerodinámicamente estable ($We_g < 6$). En los casos con mayor refinamiento la proporción en volumen de gotas con bajo número de Weber es mayor.

5.6. Caracterización detallada de caso pulsante

Los resultados expuestos en las secciones precedentes permiten observar a grandes rasgos las características de las poblaciones de gotas y definir el efecto de las condiciones de flujo y la configuración del método numérico. En esta sección, se analizarán las estadísticas relacionadas a la geometría global de la nube, cuantificando las diferencias entre los casos MPG y MPF.

5.6.1. Análisis estadístico de gotas

A partir de esos datos, una descripción más completa del aerosol incluye considerar la distribución espacial de las gotas y las condiciones de flujo en la que se encuentran. Tal es el objetivo de esta sección: completar la descripción ya realizada con información de localización espacial de las estructuras.

Por otra parte, analizar la curvatura de las estructuras líquidas permite detectar rápidamente qué gotas se encuentran sub-resueltas.

En las secciones anteriores se analizó el rango temporal (0-10 μs); en las secciones siguientes se presentan resultados para una malla $h = 1,42 \mu m$ (*Coarse*), con la que se simulaban mayores períodos de tiempo hasta alcanzar la longitud de *breakup* L_{bu} , como se muestra en la Figura 5.37, donde se observa el corte de VOF y velocidad

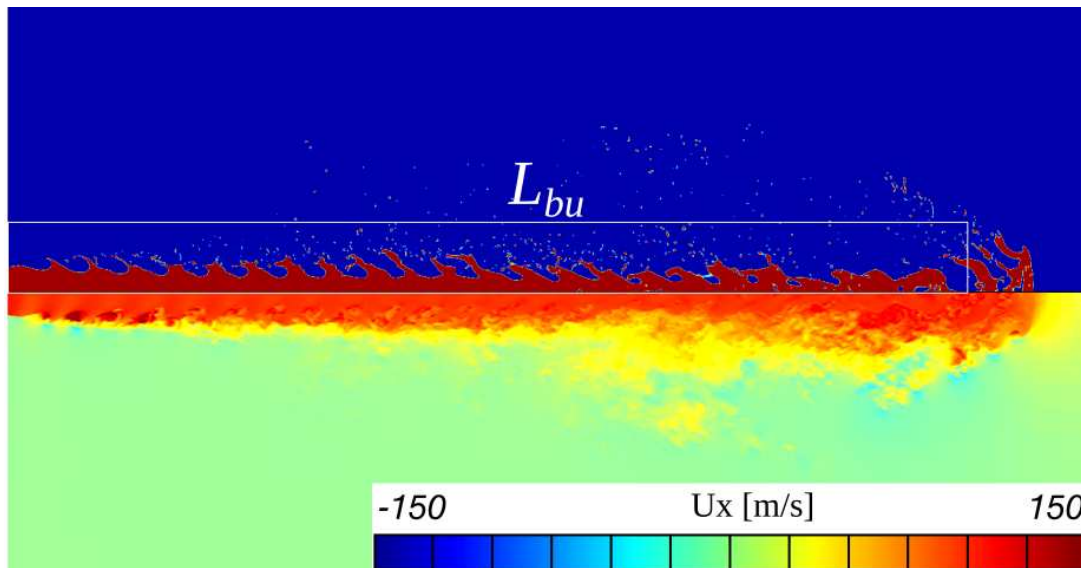


Figura 5.37: Corte de plano medio: campo VOF y u_x a $t = 24 \mu s$. $h = 1,42 \mu m$. $L_{bu} \approx 21D_{inj}$

axial. Esta representación del campo de velocidades permite observar el espesor de la capa límite y los vórtices en la región media del chorro, donde alcanzan la mayor distancia del eje, como se observó en la Figura 5.6.

La Figura 5.38 presenta en vista isométrica la evolución temporal del caso M con malla $h = 1,42 \mu m$, donde puede observarse la ruptura de la punta en láminas de gran volumen. Estas imágenes permiten apreciar la deformación de la lámina frontal, que entre los tiempos $12 \mu s$ y $18 \mu s$ sufre el crecimiento de inestabilidades irregulares; la atomización del frente del chorro genera láminas de gran tamaño. Los histogramas en la Figura 5.39 permiten además observar que la presencia de estas estructuras, de alto D_{30} pero D_{32} medio debido a su nivel de deformación, es más frecuente a partir de $18 \mu s$.

Por otra parte, se comparan los resultados de las instancias iniciales con la simulación $h = 0,48 \mu m$ (*Fine*) a fin de analizar si las tendencias se cumplen en ambos casos, a pesar de que la malla gruesa genere una población de mayor tamaño. En este contexto, es importante recordar que un paso de malla más grueso implica una predicción por exceso de volumen atomizado, pero en menos cantidad de gotas con mayor tamaño. Esto puede verificarse en los histogramas 5.39, donde puede observarse que la moda del caso refinado ($D_{30} \approx 1,25 \mu m$) a los $12 \mu s$ mantiene una población mayor al doble del rango más poblado del caso grueso a los $29 \mu s$.

En la caracterización de un *spray* es importante tanto la penetración como el ángulo de cono. Respecto a la primera, en la Figura 5.40 puede observarse que al avanzar la

punta del chorro, la nube de gotas aguas arriba mantiene una cantidad de gotas estable. Esta gráfica también permite observar la velocidad de penetración, alcanzando casi 2.5 mm en $30 \mu s$. La distribución acumulativa permite observar que, aún con la malla gruesa, la distribución axial del volumen atomizado (relativo) que parece tender a una función prácticamente lineal. En ambos casos, el acuerdo entre simulaciones es alentador.

Considerando los aerosoles por secciones, la cantidad de gotas en el caso fino es un orden de magnitud superior al caso grueso. Esto es más evidente al observar la

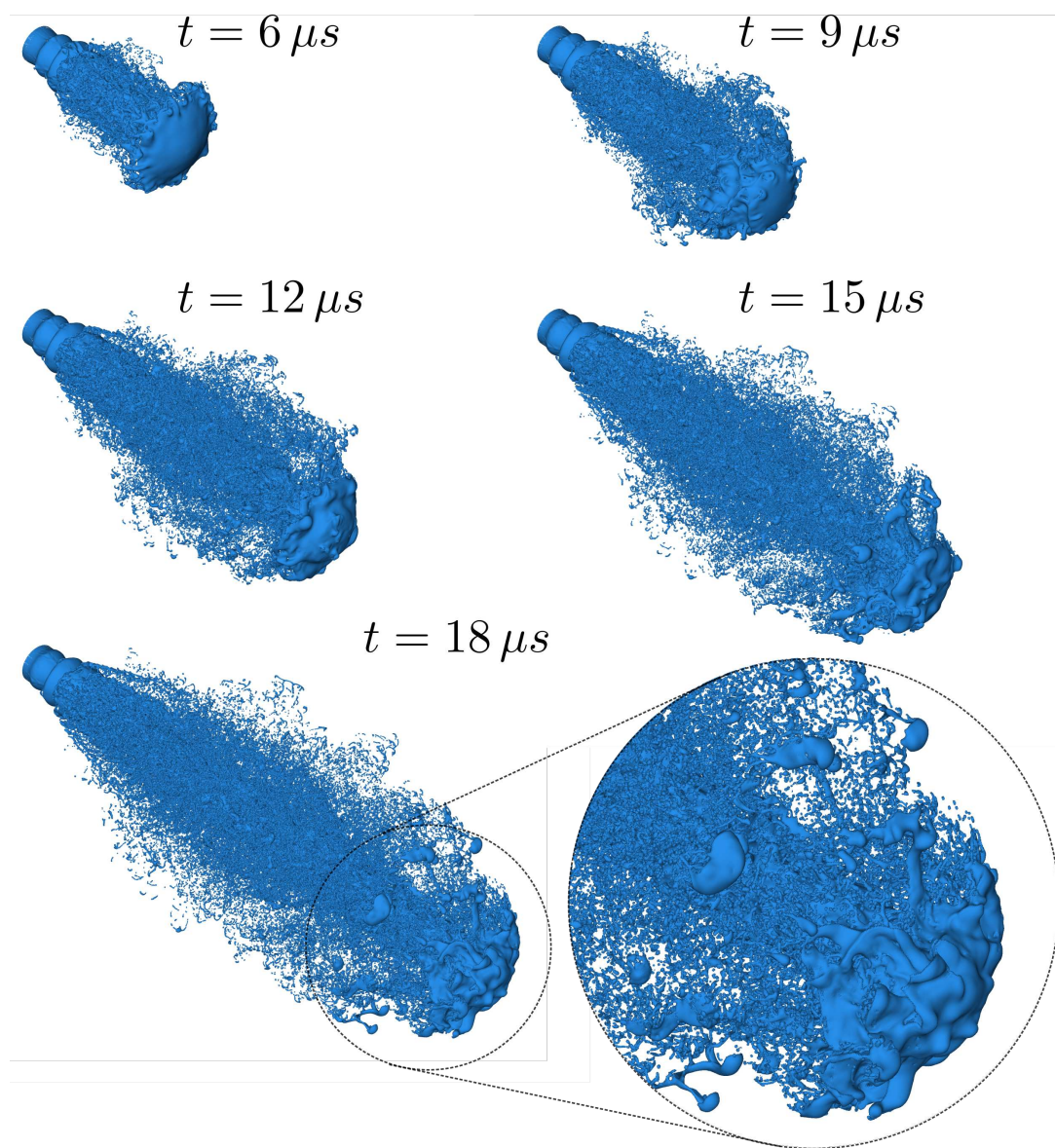


Figura 5.38: Fotogramas de la evolución para caso MPG.

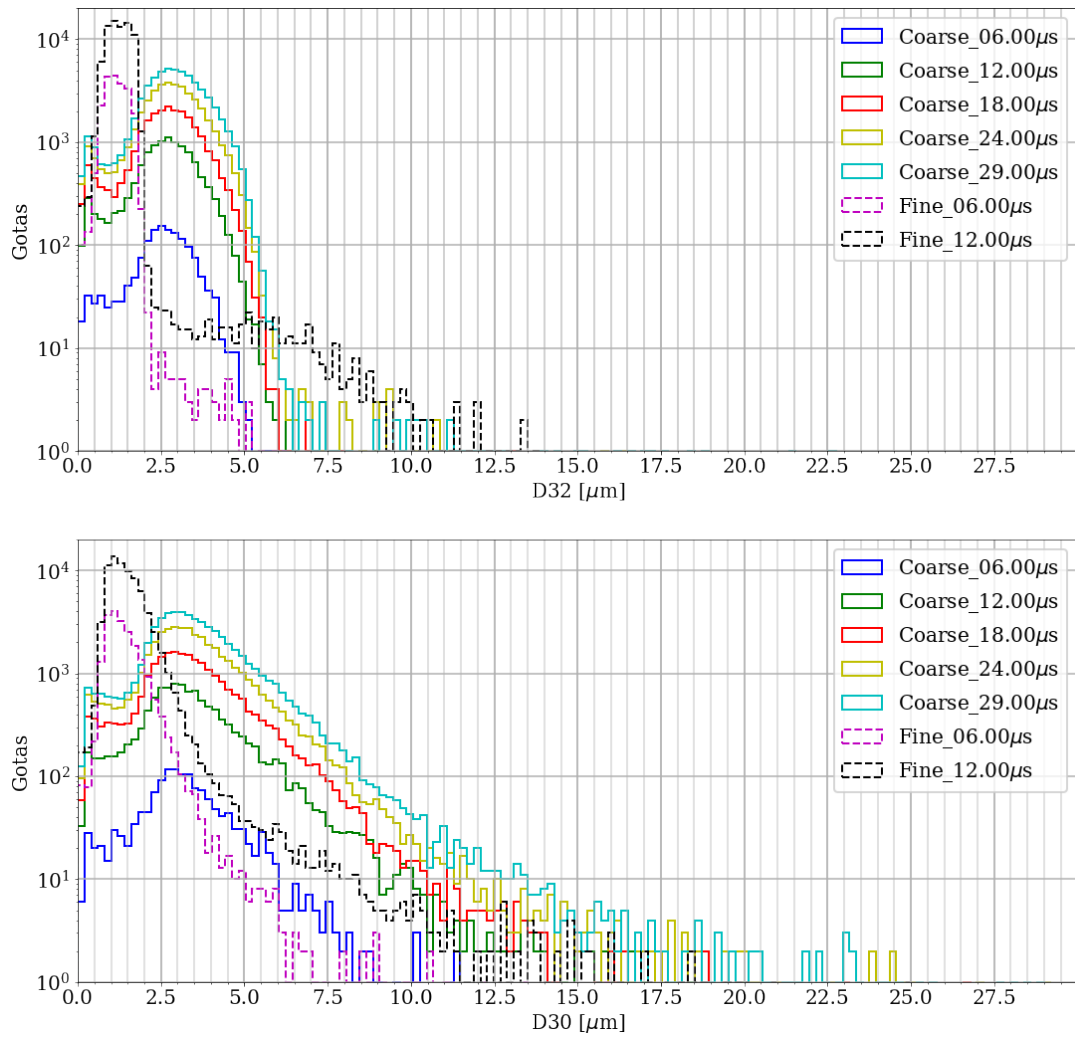


Figura 5.39: Histograma, diámetro de gotas (D32 y D30): comparación de resultados para malla $h = 1,42\mu\text{m}$ y $h = 0,48\mu\text{m}$ (instantes iniciales)

Figura 5.41, donde se observa la superioridad de gotas del caso fino hasta $x = 1\text{mm}$, siendo ésta la penetración máxima alcanzada en $12\mu\text{s}$.

Un análisis similar puede realizarse observando la expansión radial de la nube. En este sentido, la Figura 5.42 muestra los histogramas y CDFs correspondientes. A medida que transcurre el tiempo, algunas gotas se alejan del eje expandiendo los límites del histograma. Sin embargo, a diferencia de lo que sucede en el sentido axial, durante el tiempo de simulación la cantidad de gotas en un radio dado no se estabiliza. Es decir, a medida que avanza la simulación, cada región anular coaxial con el inyector aumenta su población.

Por otra parte, la presencia de gotas desprendidas en regiones cercanas al eje implica que el núcleo líquido pierde coherencia. Este fenómeno denota la pérdida

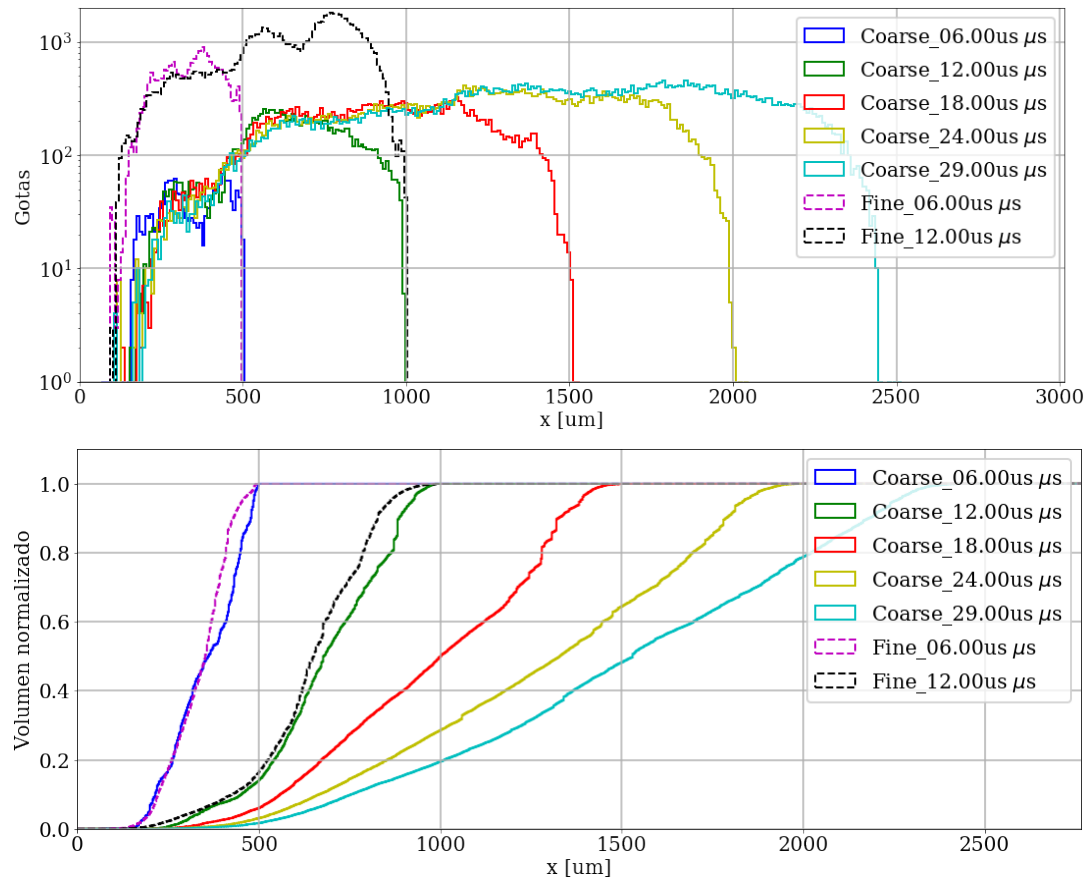


Figura 5.40: Posición X de gotas. Histograma (arriba) y Distribución acumulativa (CDF, abajo)

de coherencia del chorro, lo que marca que la simulación se encuentra cercana a la formación del núcleo y el régimen de atomización estadísticamente estacionario.

Finalmente, la distribución acumulativa permite observar el efecto que la velocidad de las gotas tiene en el transporte de masa. Por ejemplo, a los 29 μs el 40% del volumen atomizado se encuentra a más de 4 radios del eje x . Sin embargo, cabe notar que para el tiempo 12 μs la simulación *Fine* presenta una concentración de gotas más cercana al eje. Esto puede explicarse por el efecto del *breakup* numérico en la punta del chorro, como se analizará más adelante.

Dividiendo al dominio en cilindros de sección anular, pueden realizarse los histogramas reportados en la Figura 5.43. Como se observó en los gráficos precedentes, la población en cada región crece de forma continua, aún el cilindro central presenta gotas ya desprendidas del núcleo. Nuevamente, la simulación fina presenta, para las regiones cercanas al centro, una cantidad de gotas superior en un orden de magnitud respecto al caso *Coarse*. De hecho, en el anillo $r \in [200, 250] \mu\text{m}$ por ejemplo, la

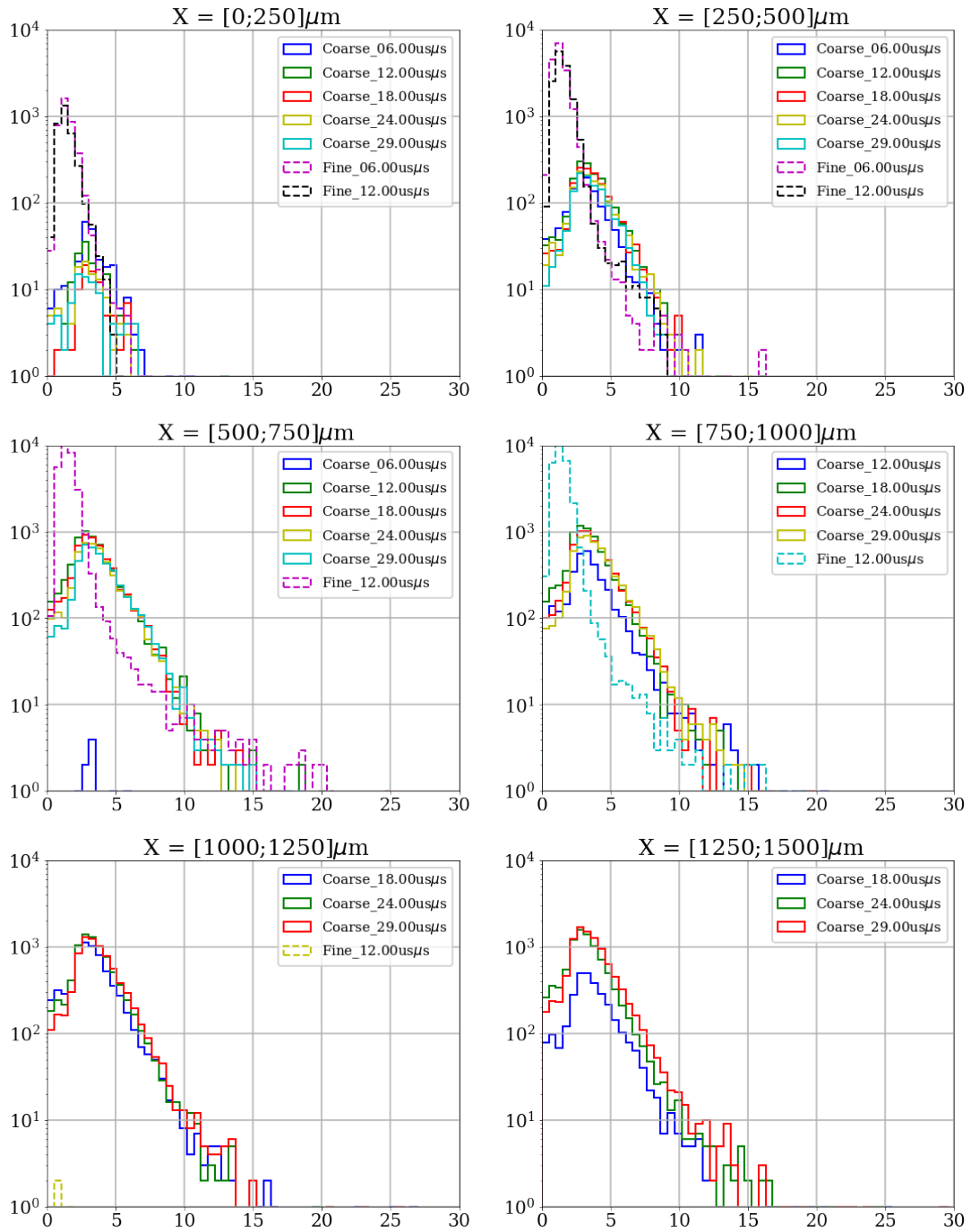


Figura 5.41: Histograma D30 de gotas dividido por segmentos de distancia a la boquilla.

simulación gruesa alcanza una cantidad de gotas similar al caso fino 6 μs después. Sin embargo, el mayor diámetro de las gotas implican que el caso grueso generará más acumulación de masa en la zona.

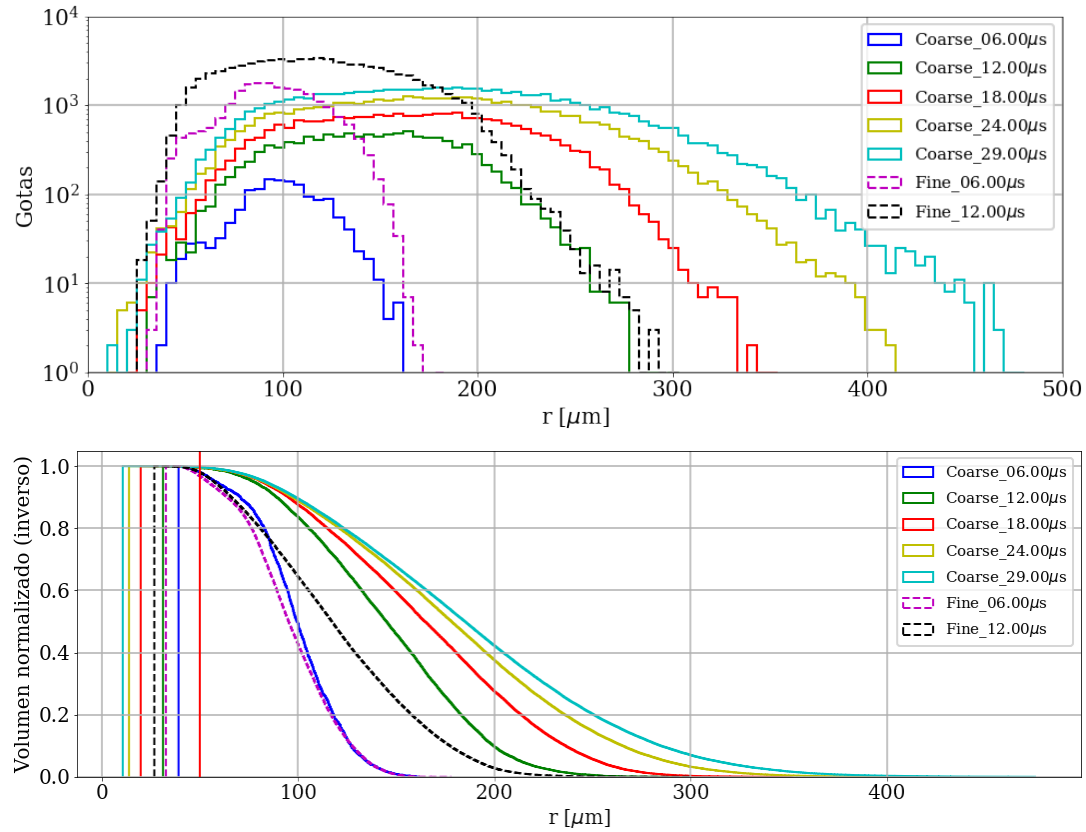


Figura 5.42: Posición radial de gotas. Histograma (arriba) y Distribución acumulativa (CDF, abajo)

Otro aspecto geométrico relevante del aerosol es el ángulo de cono. A partir de los histogramas de posición radial y axial puede calcularse el ángulo de cono como,

$$\tan \frac{\phi}{2} = \frac{r - R_{inj}}{x}. \quad (5.14)$$

donde r y x son las coordenadas de la gota en un sistema cilíndrico alineado con el eje del inyector. Esta definición deriva de considerar un cono truncado en la sección de inyección, como indica Baumgarten [10]. Así, puede representarse el ángulo de cono de cada gota y graficar la distribución acumulativa como en la Figura 5.44. En primera instancia, el cambio de sección abrupto y la pulsación dota a las gotas de una velocidad radial que las impulsa rápidamente hacia fuera del eje, generando un ángulo inicial amplio. El transcurso del tiempo provoca una reducción del ángulo, dada la alta velocidad de inyección y la regularización del flujo cercano a la boquilla.

Cabe destacar que no existe un criterio cuantitativo para determinar las variables geométricas globales del *spray* a partir de los gráficos precedentes. Las dimensiones de la nube se definen visualmente en los experimentos y no es trivial definir un umbral

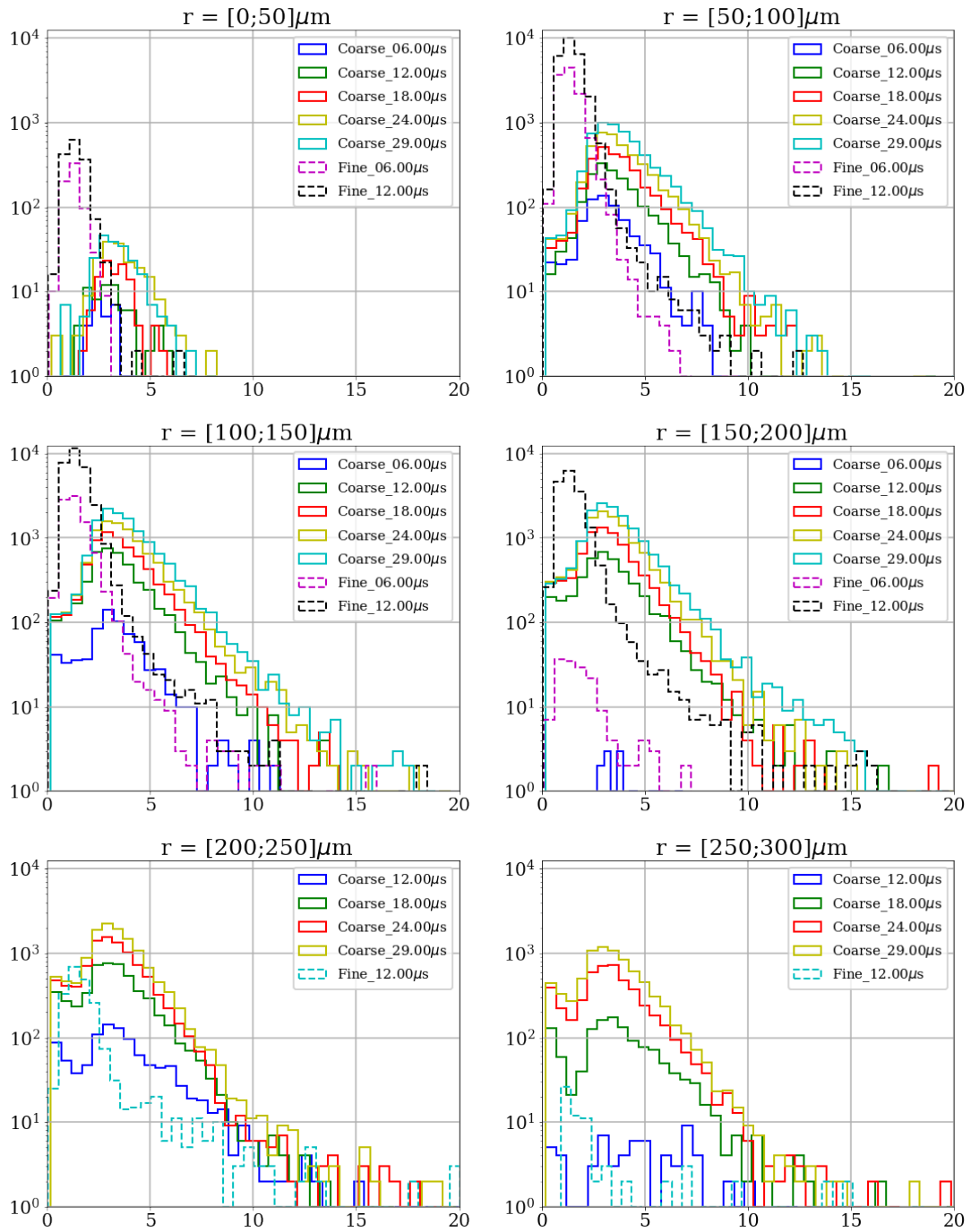


Figura 5.43: Histograma D30 de gotas dividido por segmentos de distancia a la boquilla.

donde ubicar, por ejemplo, el ángulo límite de cono. De esta manera, los resultados de la simulación permiten dar una descripción cuantitativa, mas detallada que la experimental. Asimismo, podría definirse un ajuste para la tasa de atomización en base a los parámetros de flujo y no basado sólo en las características de la nube de gotas ya

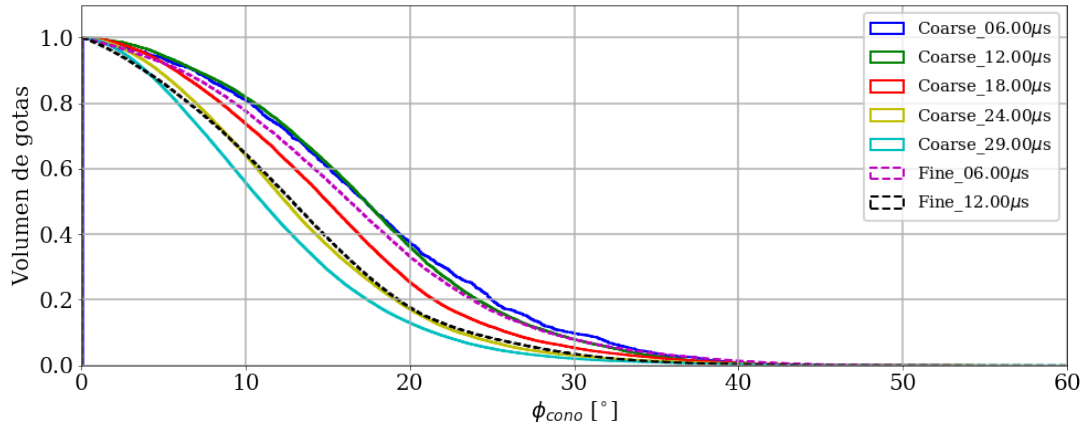


Figura 5.44: Distribución acumulada normalizada en volumen, definición de ángulo de cono.

expuesta. Esto requiere, por supuesto, de una mayor variedad de casos de estudio con una variación de parámetros más amplia.

Otra manera de caracterizar la evolución temporal es observar la progresión del histograma, como se muestra en la Figura 5.45. Esta Figura en particular es una extensión de la Figura 5.31, en la que se observa, por ejemplo, que entre los 10 y 30 μs el volumen de gotas pequeñas (menor a $3\mu\text{m}$) crece aproximadamente en un factor

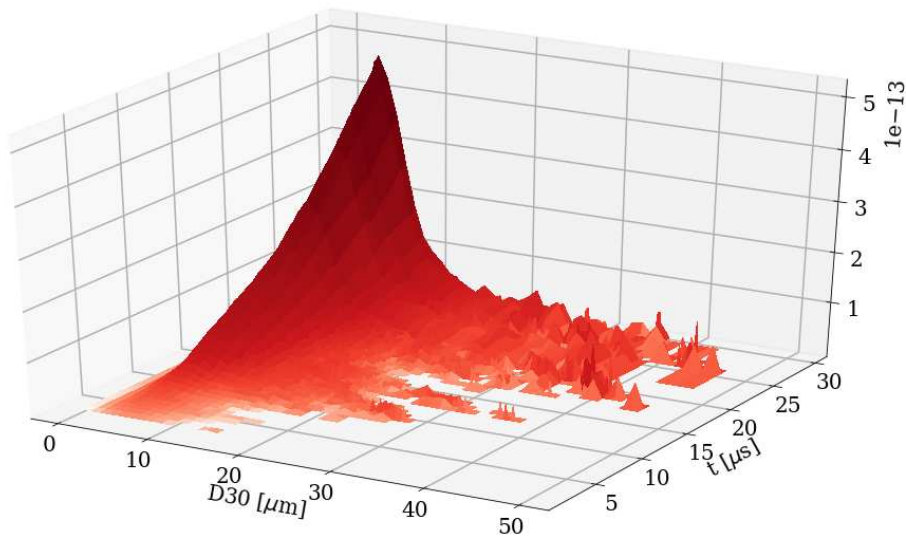


Figura 5.45: Evolución temporal de la distribución de volumen atomizado ($h = 1,42\mu\text{m}$).

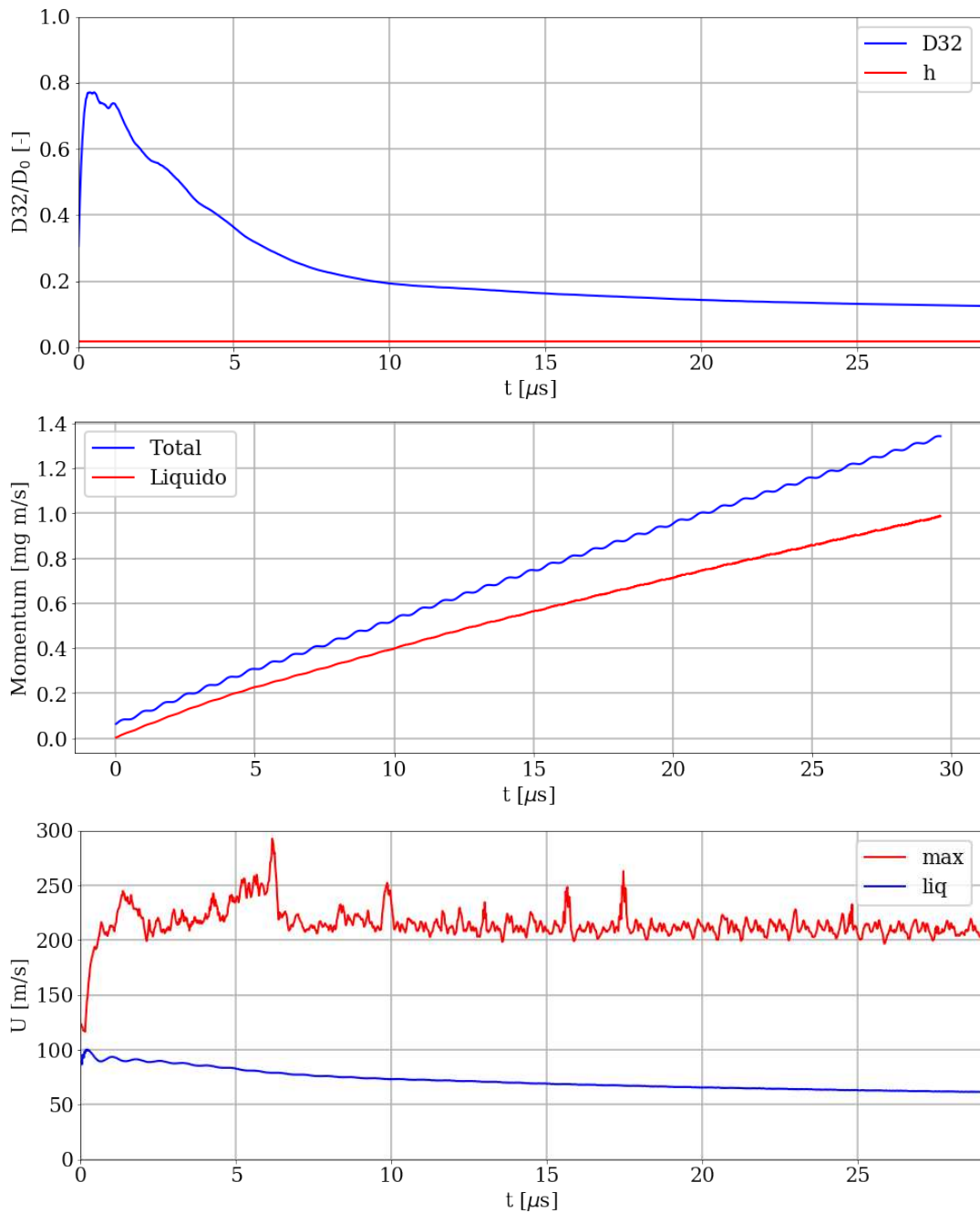


Figura 5.46: Variables globales de flujo, de arriba hacia abajo: SMD, momento lineal y velocidad media y máxima. ($h = 1,42 \mu\text{m}$)

10. Asimismo, a partir de los $18 \mu\text{s}$ se genera una población estable de gotas medias y grandes.

Para extender el análisis global de atomización primaria, las Figuras 5.46 reportan la evolución de propiedades medias del *spray*. En cuanto al SMD, puede observarse mantiene la tendencia decreciente. Esto es esperable, ya que la punta aún no se ha

desprendido totalmente, punto a partir del cual la atomización secundaria reduce el área de interfase a ritmo más acelerado.

En cuanto a la evolución de momento, a partir de los $15 \mu\text{s}$ el efecto del arrastre aerodinámico se hace más notorio. Esto puede deberse al mezclado entre fases (*entrainment*) generado por la fragmentación del núcleo, observada previamente en la Figura 5.38. La velocidad media del chorro, por lo tanto, también decrece, como puede observarse en el último gráfico. Aún así, el momento total sigue creciendo debido a la continuidad de la inyección. Por otra parte, la velocidad máxima se muestra estable, lo que indica que las estructuras turbulentas en la capa límite de la fase gaseosa ya han alcanzado su mayor nivel energético.

Más allá de todos estos resultados, a fin de desarrollar un modelo de atomización algebraico es necesario identificar los diferentes mecanismos de fragmentación que se presentan en cada región del chorro. A fin de avanzar en ese aspecto, se procede a un análisis visual de las estructuras de gotas en la sección siguiente.

5.7. Sumario de atomización primaria

Respecto a las capacidades y limitaciones de la técnica de simulación

- Se ha logrado realizar simulaciones AMR que se condicen con resultados de mallas cartesianas [159, 151]. Esto implica un gran ahorro de costo computacional, fundamental para utilizar DNS, a futuro, como un *laboratorio virtual*.
- Se desarrollaron simulaciones con pasos de malla acordes a las principales escalas características del problema. Si bien *a priori* el paso de malla era suficiente para representar las inestabilidades características en condiciones de flujo ideales, un mayor refinamiento es necesario para representar las perturbaciones de onda corta, las inestabilidades capilares y sobre todo los tiempos de fragmentación.
- La atomización del chorro depende entonces en gran medida de la malla empleada. Como ha sido ampliamente reportado en la bibliografía, el diámetro moda se mantiene cercano a dos o tres pasos de malla. Si bien no parece haberse alcanzado la convergencia en este aspecto, el máximo refinamiento empleado es similar a las simulaciones más refinadas disponibles en la bibliografía [159]. Aún empleando un paso de malla apto para representar las gotas más pequeñas, emplear pasos de malla mayores a las inestabilidades de la interfase que producen la fragmentación afecta el perfil de la distribución de probabilidad.

- La condición de contorno propuesta por Klein [79], que busca representar el flujo interno de la boquilla, desarrolla deformaciones irregulares en la superficie, dando lugar a un mayor rango de longitudes de onda. Sin embargo, el grado de atomización obtenido es considerablemente menor al observado en los casos pulsantes, debido a que la amplitud de las inestabilidades es menor.

Respecto a la caracterización de la atomización primaria,

- Al calcularse la evolución del volumen atomizado en el tiempo, se ha podido estimar la tasa de generación de gotas global. Vinculando este resultado con la caracterización geométrica de las gotas, se describió en detalle el proceso de atomización.
- Las gotas de mayor tamaño surgen principalmente en la punta del chorro, al perforarse la lámina que se forma a partir del paraguas.
- Una vez que la punta del chorro se aleja más de un diámetro en el sentido axial, la nube de gotas en esa zona entra en un régimen estable, en el que las gotas mantienen la distribución de tamaño, posición y velocidad. Esto demuestra el fuerte carácter *advectivo* del fenómeno, el transporte de propiedades sigue la velocidad de inyección.
- Si bien el rango de volúmenes de las gotas desprendidas es amplio (D_{30}), los valores de D_{32} se mantienen relativamente pequeños, ya que la mayoría de estructuras de gran tamaño son filamentos y láminas desprendidas de la punta con un alto grado de deformación.
- A medida que se desarrolla el flujo, las gotas sufren el arrastre del gas y se estabilizan rápidamente a bajos valores de Weber.
- La duración de las simulaciones desarrolladas no es suficiente para alcanzar un flujo totalmente desarrollado. A partir de los $10 \mu s$ se observa una reducción considerable de la derivada del $\overline{D_{32}}$ para la nube de gotas. Si bien esta variable parece estabilizarse a partir de $20 \mu s$, mantiene una leve tendencia negativa. Por otra parte, tanto la expansión radial como la formación del cono parecen encontrarse aún en desarrollo.

Capítulo 6

Atomización Secundaria

Los casos analizados en el capítulo anterior describen la atomización primaria y secundaria en conjunto, caracterizándolas como un único proceso.

Esto eleva la complejidad de hallar una descripción en términos de formulaciones algebraicas, ya que las condiciones de flujo y el tamaño de las estructuras líquidas se presenta en un rango muy amplio. Es decir, hallar una descripción universal de la atomización para todas las escalas del fenómeno es un objetivo demasiado ambicioso.

Por esta razón, este capítulo está orientado a analizar casos simplificados de atomización secundaria basados en condiciones locales extraídas de los resultados anteriores, considerando una gota esférica en un flujo uniforme. Esta configuración particular tiene además la ventaja de cumplir con las hipótesis correspondientes a los modelos DPM usualmente aplicados en la simulación de motores.

En cada caso se estudia la deformación y aceleración de la gota. Si las condiciones son propicias para atomizar la gota, se determina qué tiempo debe transcurrir hasta la fragmentación de la gota, comparando el resultado con un modelo de atomización basado en la inestabilidad de Kelvin-Helmholtz [142].

Analizando la progresión de diversos casos en estas condiciones, se verá si la conjunción de resultados aplicados con la dispersión de la nube en el problema del chorro describe correctamente el aerosol completo.

6.1. Atomización de gotas por efectos aerodinámicos

La deformación y fragmentación de gotas líquidas sumergidas en un flujo gaseoso es un problema ampliamente estudiado en la bibliografía, experimentalmente [128, 43, 54] y empleando métodos numéricos [78, 90, 171, 107].

Los resultados de estos estudios han demostrado que el principal parámetro que afecta la evolución de la gota es el We_g . Algunos autores han desarrollado una clasifi-

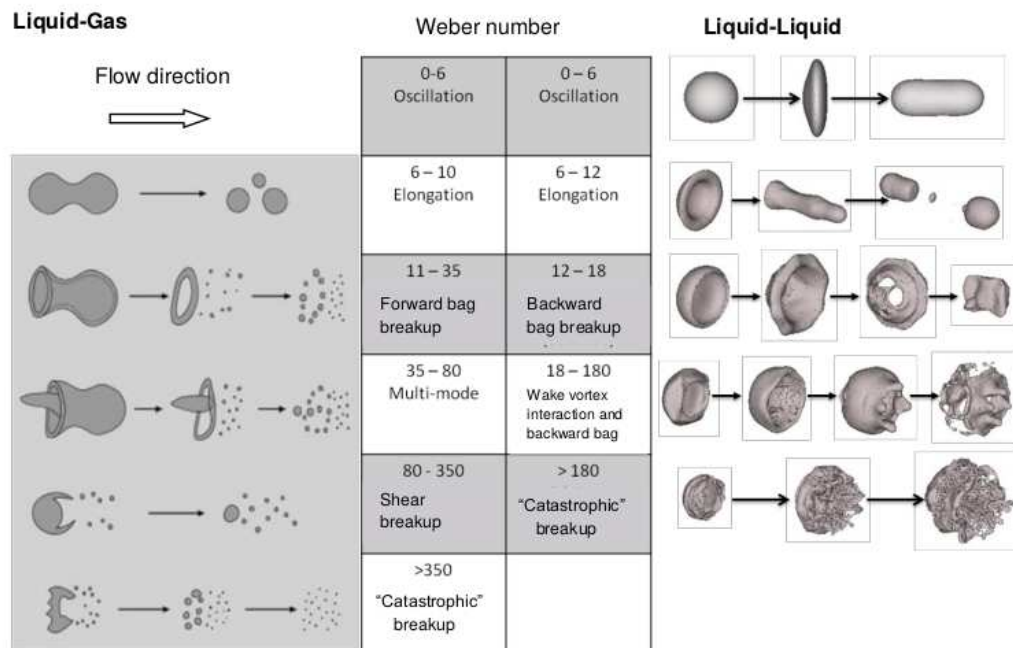


Figura 6.1: Modos de *breakup* de gotas líquidas en corriente gaseosa (izquierda [128]) y de gotas en flujos líquido-líquido (derecha [19])

cación cualitativa de los modos de fragmentación definiendo umbrales de transición entre modos, como se lista en la Figura 6.1.

Estos umbrales de números Weber reportados son, sin embargo, considerablemente variables, demostrando que una descripción basada sólo en este número adimensional es demasiado limitada. Algunos autores sugieren fórmulas compuestas para determinar el número de Weber de transición, basadas en el número de Ohnesorge [43]. Otros trabajos muestran que los modos de fragmentación dependen también del cociente de viscosidades [54] o de densidades [18].

Así, una descripción más general de la atomización secundaria se ha desarrollado en términos de competencia de inestabilidades hidrodinámicas, considerando que el modo de fragmentación estará dominado por el fenómeno de menor tiempo característico [78]. Se distinguen como mecanismos de deformación y atomización a la Inestabilidad de Rayleigh Taylor (RTI), la Inestabilidad de Kelvin-Helmholtz (KHI) y la generación de una capa de mezcla inducida por corte viscoso *Shear Induced Entrainment* (SIE) [107].

A medida que el We_g aumenta, las longitudes de onda críticas de RTI y KHI disminuyen, al igual que los tiempos característicos. Cuando las longitudes de onda son comparables al tamaño de la gota, la atomización sucede por perforación, en un proceso llamado *Rayleigh-Taylor Piercing* (RTP). Los modos catastróficos, que se

reportan a We_g elevados, desarrollan deformaciones de onda corta que provocan la capa de mezcla por SIE.

La configuración de inyección diesel tiene un cociente de densidades relativamente bajo, con lo cual es esperable que su evolución se asemeje a lo reportado para casos líquido-líquido.

6.2. Casos de estudio y parámetros de simulación

Los estudios numéricos sobre atomización secundaria presentes en la bibliografía generalmente optan por condiciones de flujo uniforme. A su vez, los análisis realizados generalmente emplean propiedades correspondientes a flujos agua-aire [70, 71], si bien algunos estudios sobre condiciones cercanas a la inyección automotor han sido realizados, estos trabajos remarcen la necesidad de emplear mayores resoluciones de malla [78] o dominios tridimensionales [90]. Los problemas analizados en las siguientes secciones cumplen ambos requerimientos.

Los casos a simular se definen por las siguientes condiciones:

- **Geometría inicial:** se ubica una única gota, de diámetro D , en el eje central de un dominio cúbico de lado $L = 32D$ como se muestra en la Figura 6.2. El origen del sistema de coordenadas se considera centrado en la posición inicial de la gota.
- **Condiciones de contorno:** se emplea una condición de flujo uniforme en una de las caras del dominio cúbico ($x = -8D$). En el resto de las caras del cubo, la condición es de flujo libre a presión constante ($p = 0$).
- **Condiciones iniciales:** dado que el problema es incompresible, las condiciones iniciales están dadas por el campo de velocidad, que debe ser consistente con la condición de contorno empleada. En los casos estudiados, se utiliza flujo potencial alrededor de la gota.

Por lo tanto, dadas las propiedades de cada fase, estipuladas en la tabla 5.1 para los casos **M** y **A**, el problema físico queda totalmente definido por velocidad de flujo (U_{in}) y el diámetro de la gota (D). Los casos de interés se definieron a partir de los resultados de las simulaciones del capítulo anterior, representados en la Figura 6.3 mediante puntos rojos. Cabe destacar que en las simulaciones de atomización primaria, el gas se encuentra en reposo respecto al marco de referencia mientras que en las simulaciones de atomización secundaria se modifica el marco de referencia para considerar que la gota inicialmente se encuentra en reposo.

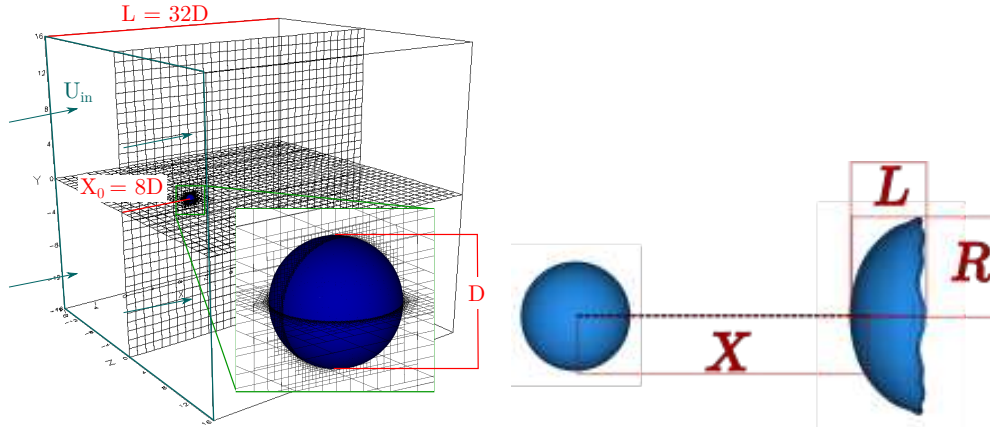


Figura 6.2: Geometría y refinamiento de malla inicial. (izquierda). Medidas de referencia relevadas en la gota (derecha), para un caso de gota de lluvia [120].

A fin de facilitar la identificación de los casos, se utiliza la nomenclatura descrita en el siguiente ejemplo. El caso con propiedades de Ménard, de diámetro $D = 10\mu\text{m}$ y velocidad $U = 50\text{m/s}$ se notará M-10-50. Así, la tabla 6.1 resume las propiedades de los casos analizados, donde el tiempo característico relacionado a fenómenos inerciales es,

$$t_{RN} = \frac{D}{U} \sqrt{\frac{\rho_l}{\rho_g}}, \quad (6.1)$$

definido por Ranger y Nicols [109] para el estudio de atomización secundaria. Este tiempo característico es relevante en procesos dominados por fenómenos inerciales, como las inestabilidades hidrodinámicas. Asimismo, se reporta el tiempo transcurrido

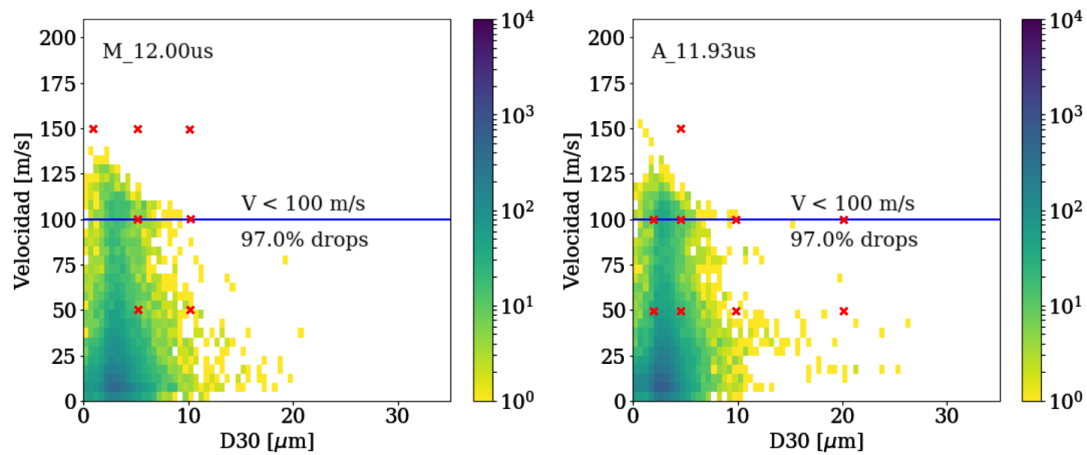


Figura 6.3: Selección de casos de atomización secundaria a partir de los histogramas a 2 vías para los casos de chorros M y A.

hasta la primera perforación de la gota, notado como t_{bu}^{init} . Para todos los casos, el tiempo de *breakup* reportado corresponde a la formación del primer agujero en la lámina. La tabla 6.1 también presenta el tiempo en μs hasta que la gota sufre la

Caso	D [μm]	U [m/s]	Re_g	We_g	$t_{RN} [\mu s]$	$t_{bu}^{init} [\mu s]$
M-1.25-150	1.25	150	468	11	0.044	-
M-5-50	5	50	625	5.2	0.53	-
M-5-100	5	100	1250	20.8	0.26	-
M-5-150	5	150	1875	46	0.17	0.39
M-10-50	10	50	1250	10.41	1.06	-
M-10-100	10	100	2500	41.66	0.53	1.1
M-10-150	10	150	3750	93.75	0.35	0.42
A-2.5-50	2.5	50	154	5.6	0.286	-
A-2.5-100	2.5	100	308	22.48	0.143	-
A-5-50	5	50	308	11.2	0.532	-
A-5-100	5	100	604	44.96	0.286	-
A-5-150	5	150	924	101.18	0.177	0.36
A-10-50	10	100	616	22.4	1.14	-
A-10-100	10	100	1232	89.94	0.57	0.89
A-20-50	20	50	1232	44.96	2.28	-
A-20-100	20	100	2464	179.88	1.14	0.95

Cuadro 6.1: Sumario de casos y tiempos de *breakup*.

perforación que provoca su posterior fragmentación.

Durante toda la simulación se aplica AMR para acotar el error numérico ($w(u) < 0,01U_{in}$) y la proporción entre el paso de malla y la escala de Kolmogorov local estimada ($h/\eta < 5$). Esto puede observarse en la figura 6.4. A modo ilustrativo, en la misma Figura 6.4 se muestra la deformación y fragmentación sufrida por la gota debido al efecto aerodinámico en el caso M-10-150. Puede observarse que efectivamente se forma una "bolsa hacia atrás", como reportan [55, 78, 19] para ρ^* relativamente bajo ($\rho^* < 100$). Posteriormente la lámina reduce su espesor hasta perforarse y producir una gran cantidad de gotas. El paso de malla en todos los casos se limita a $h = D/200$, en M-10-150 la malla tiene un paso $0.05 \mu m$.

6.3. Análisis comparativo de resultados

Se presenta a continuación una caracterización comparativa de los casos resaltados en la Figura 6.3. La Figura 6.5 muestra la evolución en el tiempo del diámetro de Sauter normalizado con el diámetro inicial (D_{32}/D_0), para los casos M y A respectivamente,

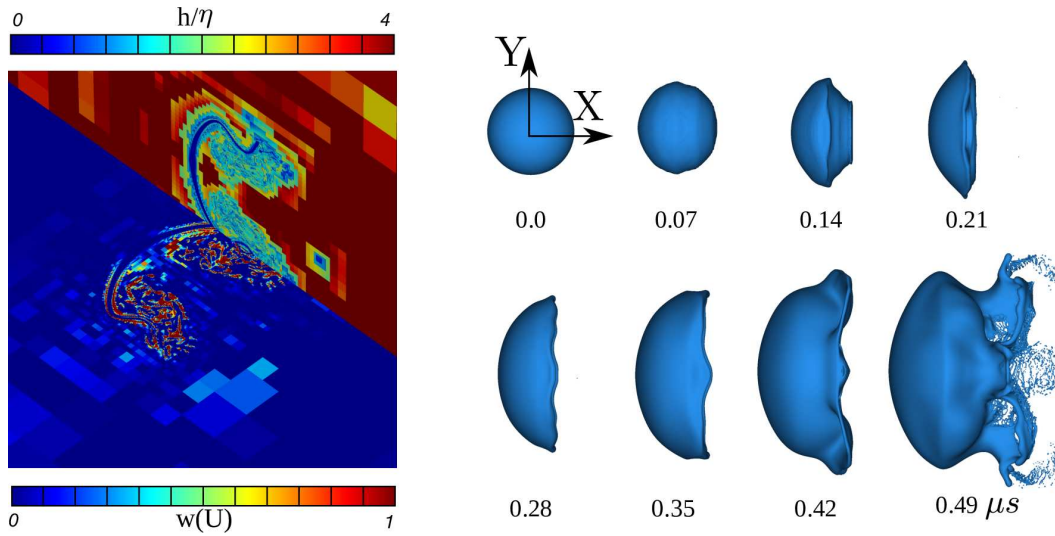


Figura 6.4: Caso: M-10-150. Izquierda: Campo $w(u)$ (planta) y h/η (lateral), en planos medios de la gota (desplazados para facilitar la visualización). Derecha: Instancias de deformación hasta la fragmentación (flujo de izquierda a derecha).

empleando el tiempo físico y la adimensionalización $t^* = t/t_{RN}$. El desarrollo del flujo en tiempo real es relevante en el contexto de la formación de sprays. No obstante, a fines de comparar los casos entre sí la descripción adimensional es más útil, dado que el régimen de flujo depende de la proporción entre variables y no de su magnitud individual. Por lo tanto, todos los análisis posteriores se realizan considerando t/t_{RN} .

De esta manera, por ejemplo, los casos M-1.25-150 y M-10-50 presentan una evolución similar debido a que en ambos el número de Weber es aproximadamente 10. Estos primeros resultados permiten observar que las gotas en regímenes a bajo número de Weber se deforman reduciendo su D_{32} pero luego recuperan su forma esférica original. Mientras menor sea el We , el período adimensional de la oscilación será menor. Este comportamiento parece extenderse hasta $We_g \approx 22$, siendo un valor crítico considerablemente superior a lo reportado en la bibliografía. Esto podría deberse al bajo número de Reynolds que presentan los casos: el flujo laminar que se desarrolla alrededor de la gota ejerce menores fuerzas de presión, cuya magnitud no es suficiente para amplificar las inestabilidades hidrodinámicas y producir la fragmentación. Guildenbecher [54, 128] menciona que el modo vibracional de atomización se desarrolla sólo en flujos considerablemente turbulentos y requiere largos períodos de desarrollo.

Una descripción más completa del proceso de deformación se encuentra en las Figuras 6.6 y 6.7, donde se muestran diámetro de Sauter (D_{32}), la longitud en el sentido axial (L) y el radio máximo de la gota (R), normalizados mediante sus valores iniciales. Las mediciones de estas variables están ilustradas en la Figura 6.2. Estas gráficas

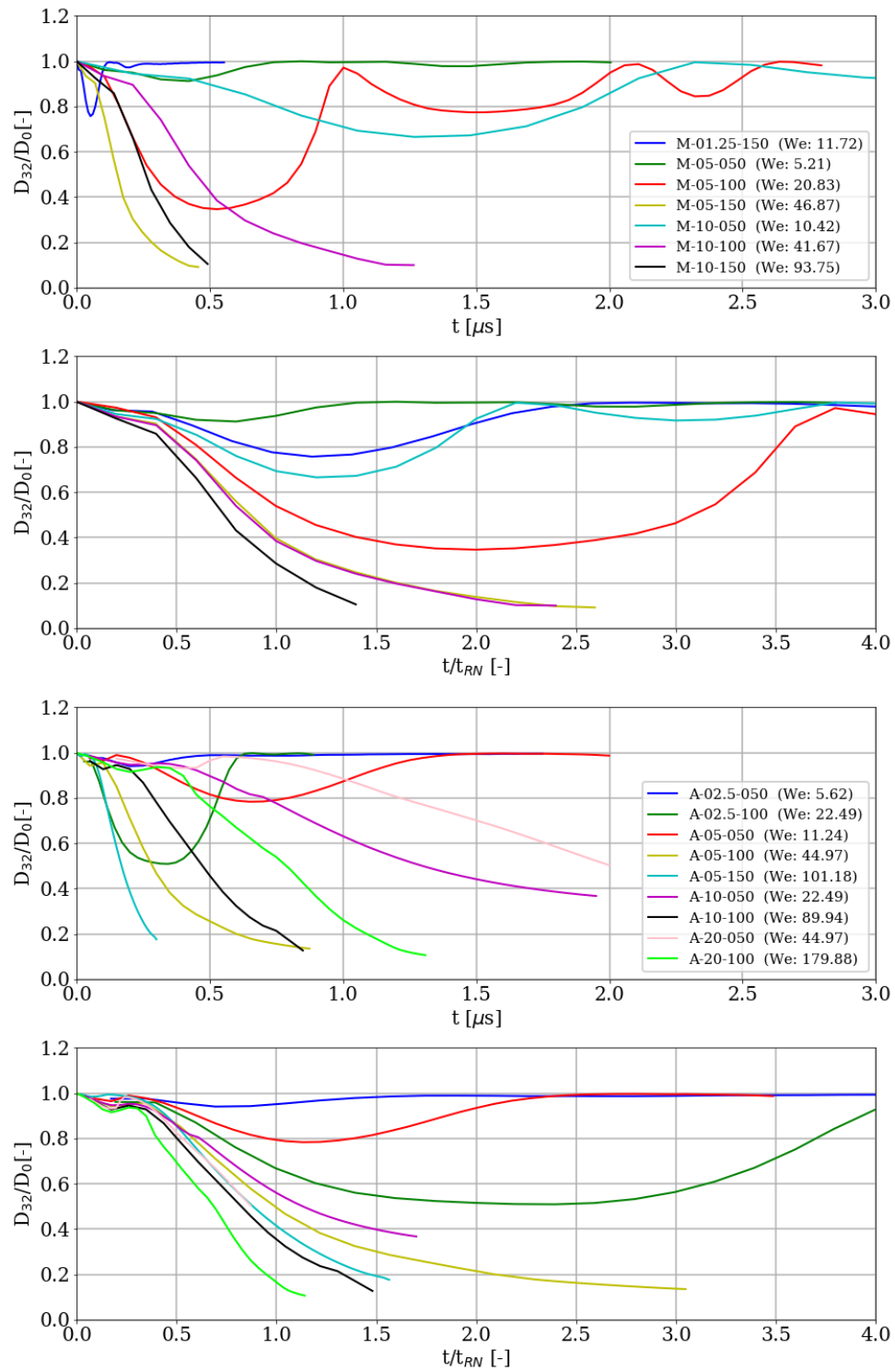


Figura 6.5: Evolución del diámetro D_{32} en tiempo dimensional y adimensional para casos M (arriba) y A (abajo).

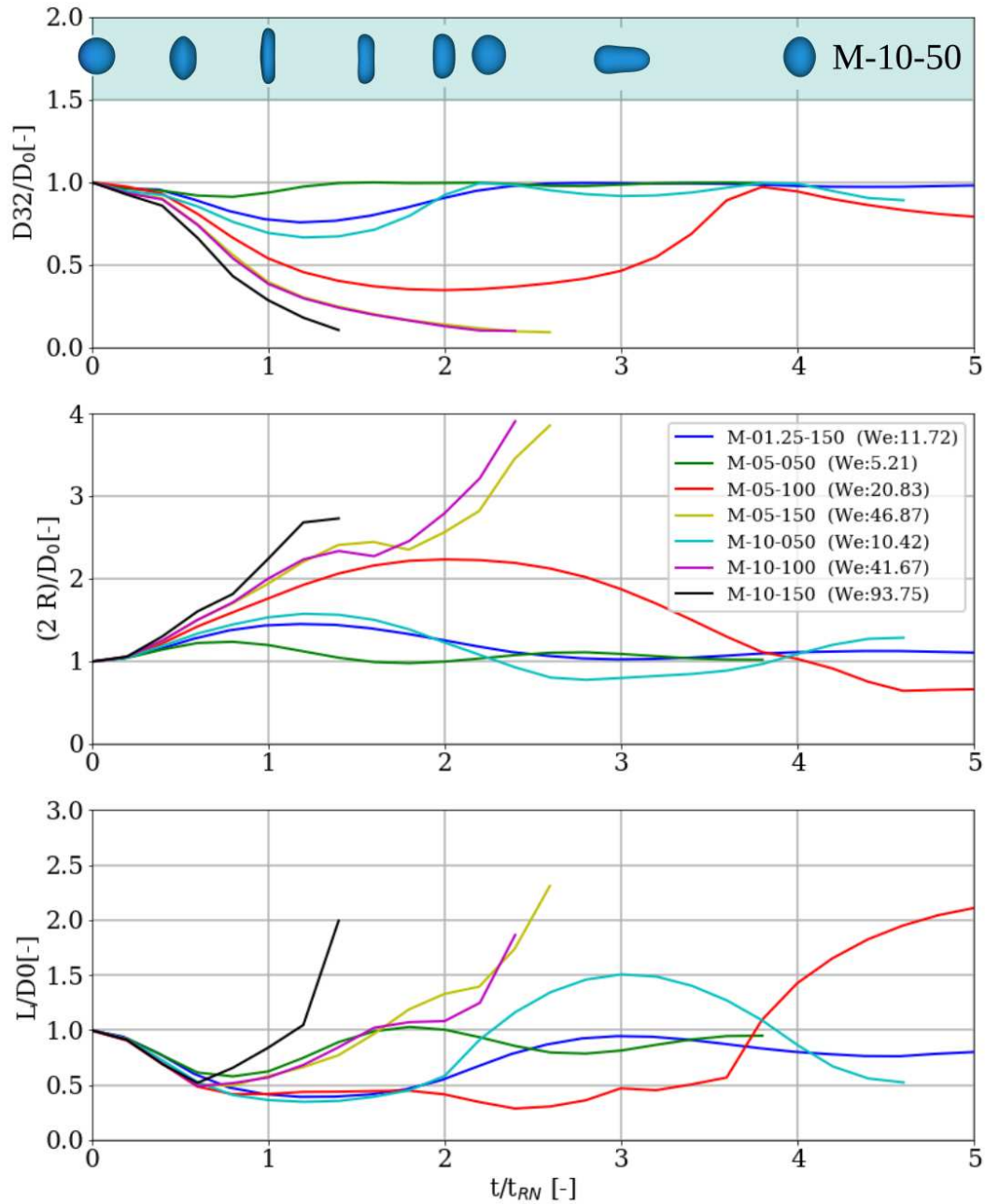


Figura 6.6: Evolución del diámetro D_{32} , R , L para casos M

permiten apreciar la expansión radial de la gota en todos los casos, que es más rápida cuanto mayor es el We_g del problema. En el sentido axial, en cambio, la gota se aplana durante las primeras instancias de deformación, formando una lámina vertical que luego puede deformarse de dos maneras diferentes. En los casos estables, como el ilustrado en la Figura 6.6 (M-10-50), la lámina formada se expande al mismo tiempo que reduce su diámetro y oscila hasta estabilizarse en su forma esférica. Si el número

de Weber es lo suficientemente elevado, la lámina -como la que se muestra en la Figura 6.4 (M-10-100)- se curvan con forma de "bolsa hacia atrás". En algunos casos, la lámina pierde espesor en las zonas cercanas al borde externo al punto que se genera una perforación a partir de la cual se desarrolla la atomización. Así, en los casos que

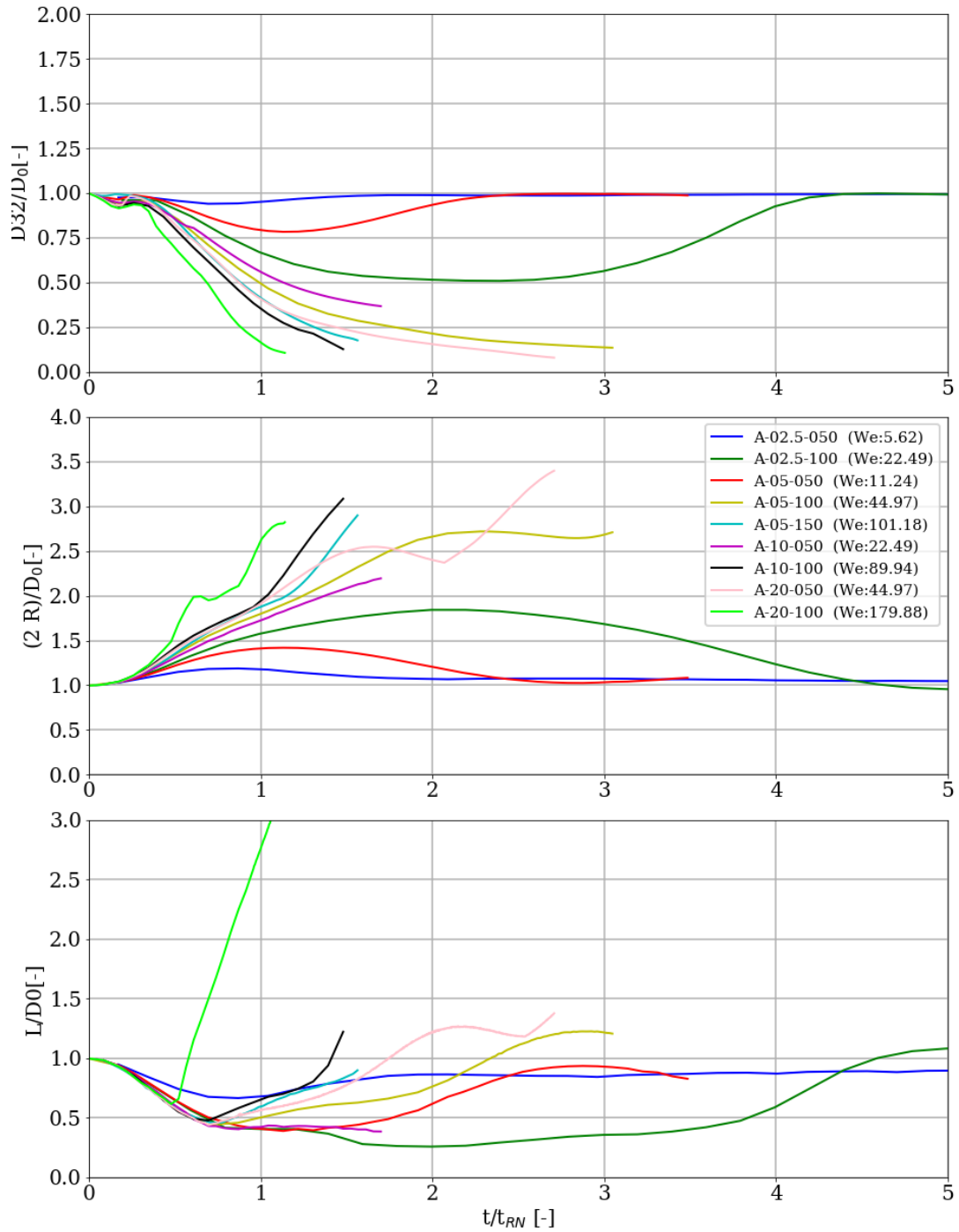


Figura 6.7: Evolución del diámetro D_{32} , R , L para casos A

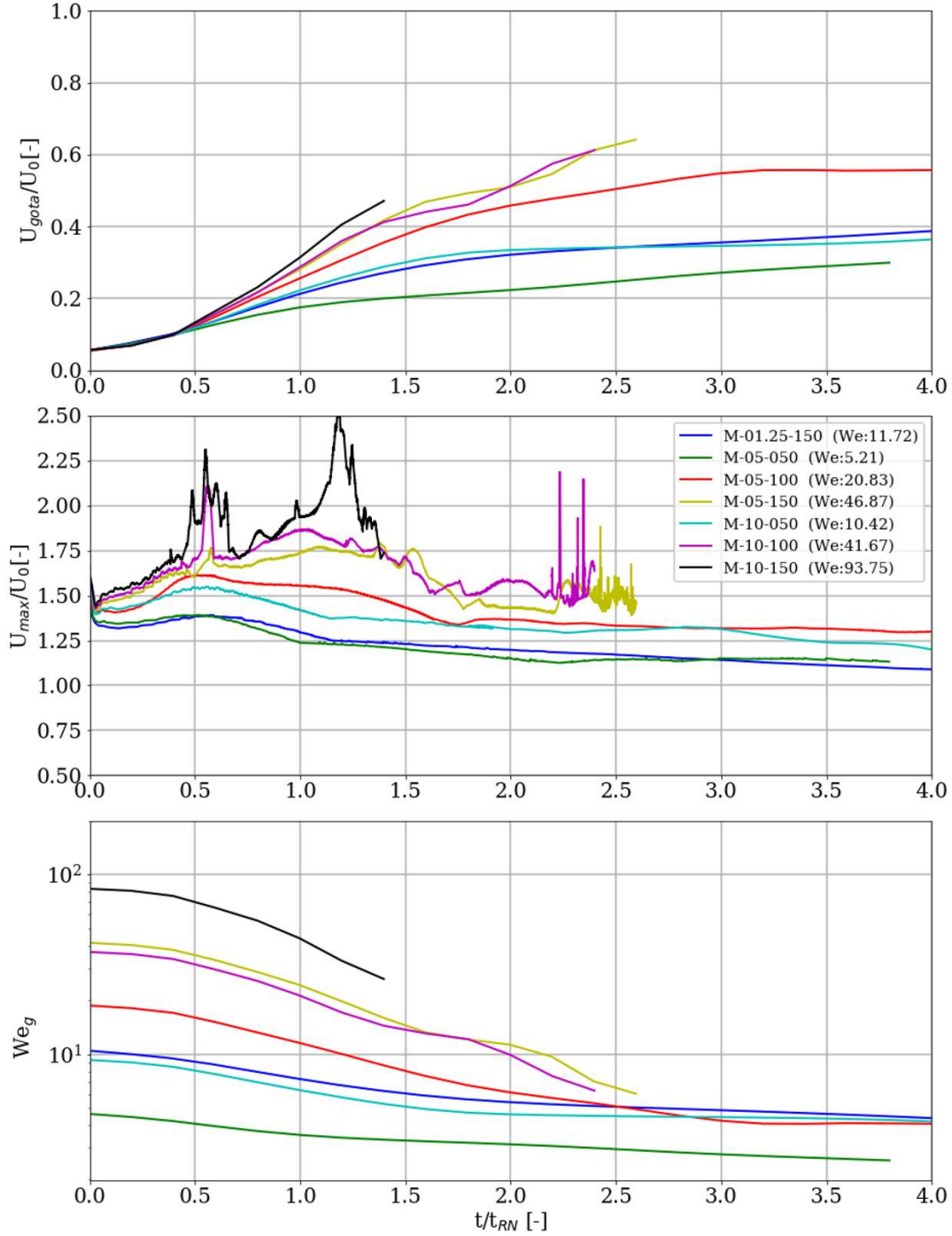


Figura 6.8: Evolución de velocidades y número de Weber para casos M

no presentan recuperación de la forma esférica pueden observarse cambios abruptos de R o L . El cambio de pendiente de estas variables (por ejemplo, para el caso M-10-100 a $t = 1,6t_{RN}$) es producto de la eyección de gotas a gran velocidad que se alejan del *bulk* líquido.

Como última instancia de comparación general se analizan, en las Figuras 6.8 y 6.9, la velocidad de la gota U_{gota} y la máxima velocidad de la fase gaseosa U_{max} . Las variaciones en U_{max} son propias de flujos turbulentos o suceden en los instantes de atomización debido a la eyección de gotas. También se muestra la evolución del

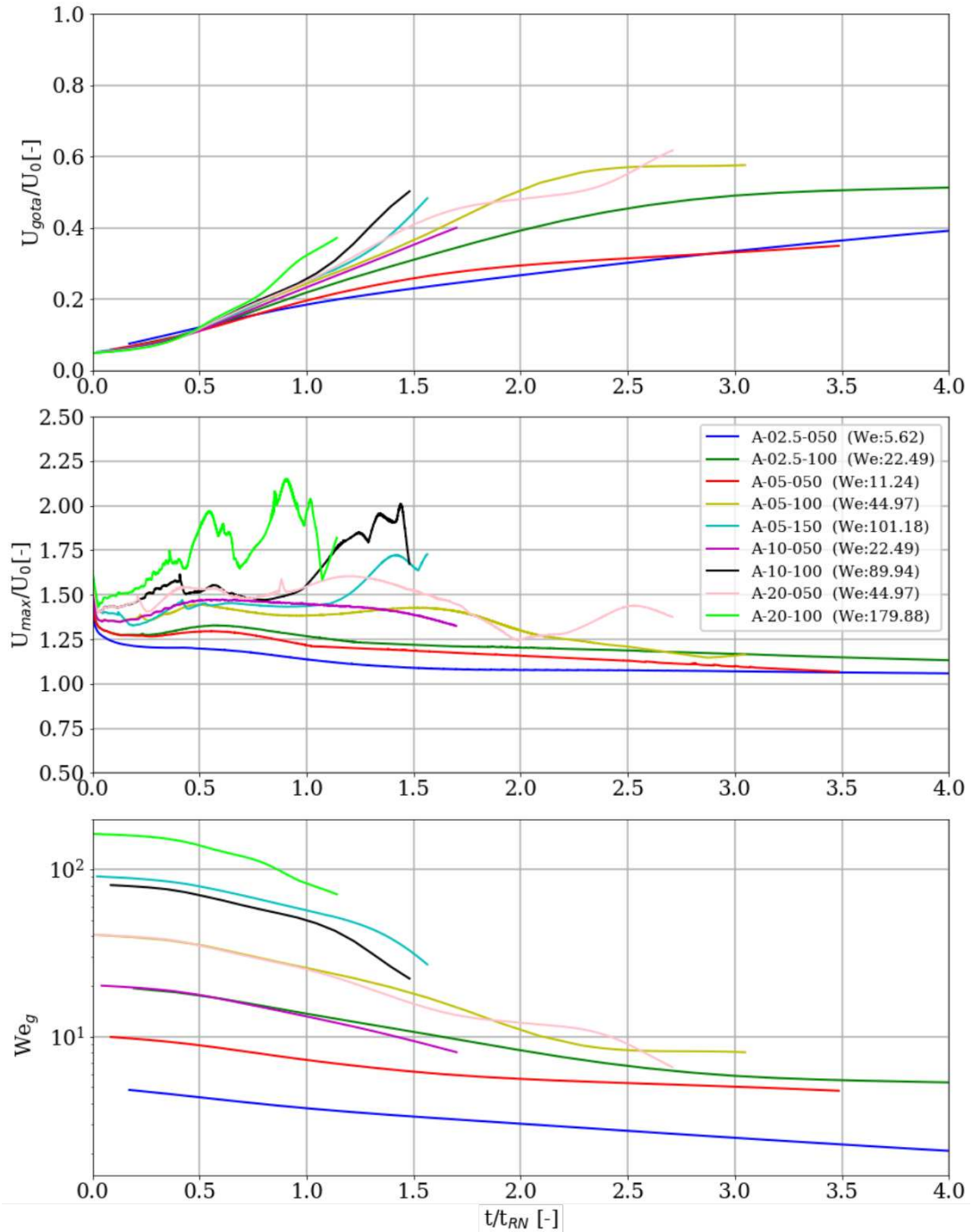


Figura 6.9: Evolución de velocidades y número de Weber para casos A

número de Weber dado por,

$$We_g = \frac{\rho_g}{\sigma} (U_{in} - U_{gota})^2 D_0, \quad (6.2)$$

es decir, considerando que We_g se reduce debido a la aceleración de la gota.

Cabe notar en la expresión anterior que el número de Weber se reduce sólo debido al cambio en la velocidad relativa. Si las dimensiones de la gota cambian a medida que ésta se deforma, el volumen se mantiene constante y por lo tanto se opta por mantener la longitud característica del problema. Al observar la evolución para los casos $We_g \approx 20$ puede notarse que durante el desarrollo del flujo las gotas se aceleran rápidamente, disminuyendo la velocidad relativa y alcanzando los rangos de estabilidad reportados en la bibliografía ($We_g < 10$). Esto podría ser una de las causas por la que sólo se observa atomización en problemas ($We_g > 22$). Esto en general sucede cuando la lámina aún puede recuperar su forma esférica; en el caso particular A-05-100, sin embargo, se alcanza una instancia de gran deformación, desarrollando una lámina que luego reduce su velocidad hasta un valor terminal de 58 m/s, alcanzando un $We_g = 8$.

De esta manera, existe una competición entre el tiempo característico de deformación, y el tiempo de aceleración de la gota hasta una velocidad estable. Considerando que solo los efectos en el sentido de flujo son relevantes, la aceleración instantánea de la gota puede computarse como,

$$F_x = \frac{\rho_g}{2} C_d (U_{in} - U_{gota})^2 (\pi R^2) \longrightarrow a_x = 3 \frac{\rho_g R^2}{\rho_l D_0^3} C_d (\Delta U)^2, \quad (6.3)$$

donde a_x es la aceleración de la gota y D_0 su diámetro inicial y C_d el coeficiente de arrastre. Luego, puede estimarse la velocidad estable de la gota,

$$We_g^* = \frac{\rho_g (U_{in} - U_{st})^2 D_0}{\sigma} \longrightarrow U_{st} = U_{in} - C_{We} \quad \left(C_{We} = \sqrt{\frac{We_g^* \sigma}{\rho_g D_0}} \right). \quad (6.4)$$

Considerando que la gota parte del reposo, el período de aceleración requerido es,

$$t_{ac} = \frac{U_{st}}{a_x} \longrightarrow t_{ac} = \frac{1}{3} \frac{\rho_l D_0^3}{\rho_g R^2} \frac{1}{C_d U_{in}} \left[1 - \frac{C_{We}}{U_{in}} \right]. \quad (6.5)$$

Para el caso A-05-100, asumiendo un $Cd_x = 0,4$ y que el radio alcanza un valor $R = D_0$, la relación entre tiempos característicos es $t_{RN}/t_{ac} \approx 2,5$. Por lo tanto, si la fragmentación no sucede en menos de $2t_{RN}$ la gota se encontrará probablemente en condiciones de flujo estable

En las secciones siguientes se analiza la evolución de los casos que presentan atomización. Para cada uno se estudia la deformación de la interfase, el radio de curvatura desarrollado y se reporta el coeficiente de la fuerza de arrastre sobre la gota (*drag*):

$$F_x = \frac{\rho_g}{2} C d_x (U_{in} - U_{gota})^2 (\pi R^2) \longrightarrow C d_x = \frac{1}{3} \frac{\rho_l D_0^3}{\rho_g R^2} \frac{a_x}{(\Delta U)^2} \quad (6.6)$$

donde a_x es la aceleración de la gota en el sentido de flujo, D_0 su diámetro inicial y las velocidades U_{in} y U_{gota} corresponden al flujo y a la gota respectivamente.

6.4. Modos de atomización secundaria desarrollados

En esta sección se analiza la transición de modos de atomización para una gota tipo M de diámetro $10\mu\text{m}$ al aumentar la velocidad de flujo. Como se observa en la región superior de la Figura 6.6, en el caso M-10-50 la gota se deforma oscilando en un modo vibracional con un período de aproximadamente $2 t_{RN} (\approx 2\mu\text{s})$.

En la misma Figura 6.6 puede observarse, analizando los casos M-10-100 y M-10-150, que a medida que la velocidad del flujo aumenta la gota se deforma más rápidamente hasta alcanzar un estado inestable en el cual se produce la atomización.

6.4.1. RTP: atomización a Weber moderado

La deformación de la gota para caso M-10-100 ($We_g = 41,6$, $Re_g = 2500$, $t_{RN} = 0,53\mu\text{s}$) se muestra en vista lateral en la Figura 6.10. Como puede observarse en el cuadro superior derecho, al cabo de $2.5t_{RN}$ la lámina ya se ha perforado, generando la eyección de gotas muy pequeñas en todas direcciones. Esto se debe a los vórtices desarrollados a partir del desprendimiento de capa límite, que pueden apreciarse en la Figura 6.11. Algunas de las gotas eyectadas desde el primer agujero ingresan en la lámina y la perforan, acelerando el proceso de fragmentación, como puede notarse en $t = 1,37\mu\text{s}$ de la Figura 6.10. Cabe notar que en dicho instante la aceleración de la gota ha reducido considerablemente su velocidad relativa ($(\Delta U)/U_s = 0,4$). Debido a esto, la atomización de la gota no es completa, dejando como residuo un ligamento de diámetro considerable. El tamaño de las estructuras producidas en la fragmentación puede estimarse a partir de la curvatura reportada en la Figura 6.12.

A fin de realizar un análisis cuantitativo, la Figura 6.13 muestra el histograma de diámetros y la distribución acumulativa de volumen normalizado de las gotas. Puede observarse que si bien la cantidad de gotas de diámetro menor a $2\mu\text{m}$ es alta (orden 1000), éstas representan un volumen inferior al 3 % del total. Cabe destacar también que los diámetros de mayor población ($D_{30} < 0,4$) se resuelven en 8 celdas o menos.

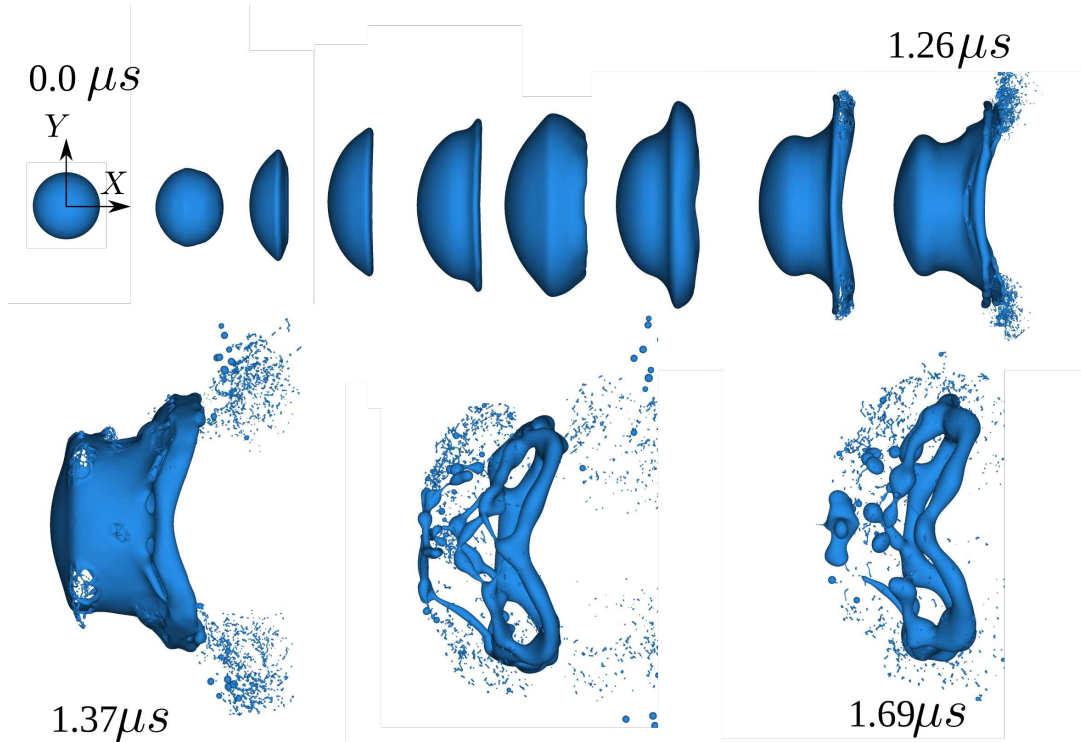


Figura 6.10: Vista lateral de deformación y fragmentación de la gota M-10-100. Intervalo de tiempo entre imágenes: $0.11 \mu s$

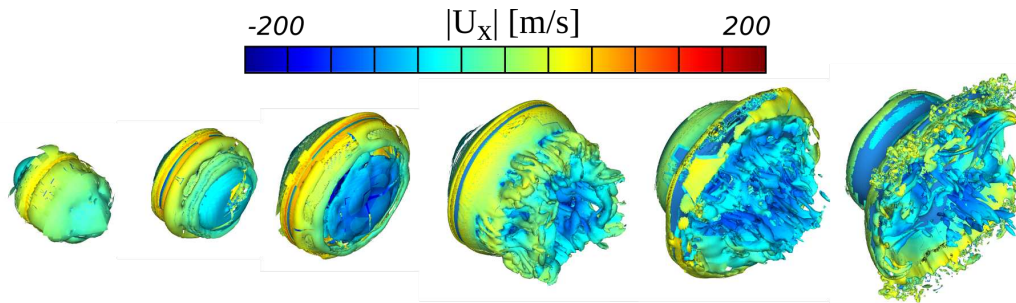


Figura 6.11: Progresión de las estructuras de vórtices y velocidad alrededor de la gota M-10-100.

Si bien esto implica que la mayoría de las gotas hijas presentan una resolución pobre, la *Función Densidad Acumulativa* (CDF) muestra que el volumen de esas gotas es despreciable (menor al 0.2 %). También puede observarse en la CDF la fragmentación del ligamento basal entre $1.58 \mu s$ y $1.69 \mu s$, que genera una gota de $3.8 \mu m$ de diámetro, momento a partir del cual el volumen atomizado alcanza un 10 % del total.

De esta manera, este modo de atomización genera en su mayoría gotas dos órdenes de magnitud menores que la gota madre ($D_{30} \approx 0.04 D_0$) que acumulan menos del 5 %

del volumen. A su vez, en el transcurso de la atomización el aro basal retiene el 90 % del volumen, quedando el 5 % restante en pocas gotas de tamaño intermedio.

6.4.2. SIE, atomización a Weber alto

La evolución del caso M-10-150 ($We_g = 93,75$, $Re_g = 3750$, $t_{RN} = 0,35\mu s$) se muestra en las Figuras 6.14. El mecanismo de deformación es equivalente al caso anterior, pero se desarrolla con mayor rapidez; las perforaciones iniciales se producen en el instante $t = 1,2t_{RN}$, es decir, el período adimensional se reduce a la mitad. En este caso, al ser la velocidad mayor, el aro basal sufre perturbaciones en el sentido transversal que producen la perforación de la lámina en varios puntos simultáneamente. Esto a su vez genera una separación más rápida entre el aro y el cuerpo de la gota. Por otra parte, las altas velocidades implican un mayor nivel de turbulencia, como puede apreciarse en la estructura de vórtices que se muestra en la Figura 6.16. Allí los vórtices más reducidos avanzan a velocidades mayores que el cuerpo de la lámina, desplazando a las estructuras más pequeñas aguas abajo. Las gotas satélite presentan diámetros inferiores a $0.1\mu m$, como puede observarse a partir de la la curvatura de la superficie representada en la Figura 6.15. Dado que la evolución de este caso es más rápida, la velocidad relativa es aún considerable en el instante en que se desprenden los ligamentos. Bajo estas condiciones, el aro basal se descompone en gotas de tamaño medio. Asimismo, la expansión simultánea de todas las perforaciones hace que el cuerpo de la lámina se fragmente en gotas más pequeñas, dando lugar a un modo caótico.

La distribución de volumen dada por este proceso de atomización se muestra en la Figura 6.17 junto con el histograma de diámetros D_{30} . En este caso, la estructura

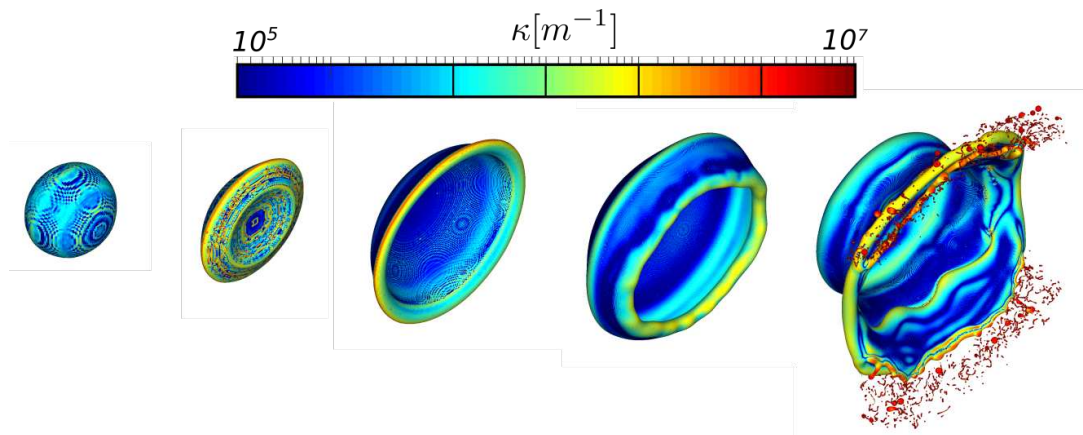


Figura 6.12: Progresión de la forma de la gota coloreada por curvatura (escala logarítmica) M-10-100.

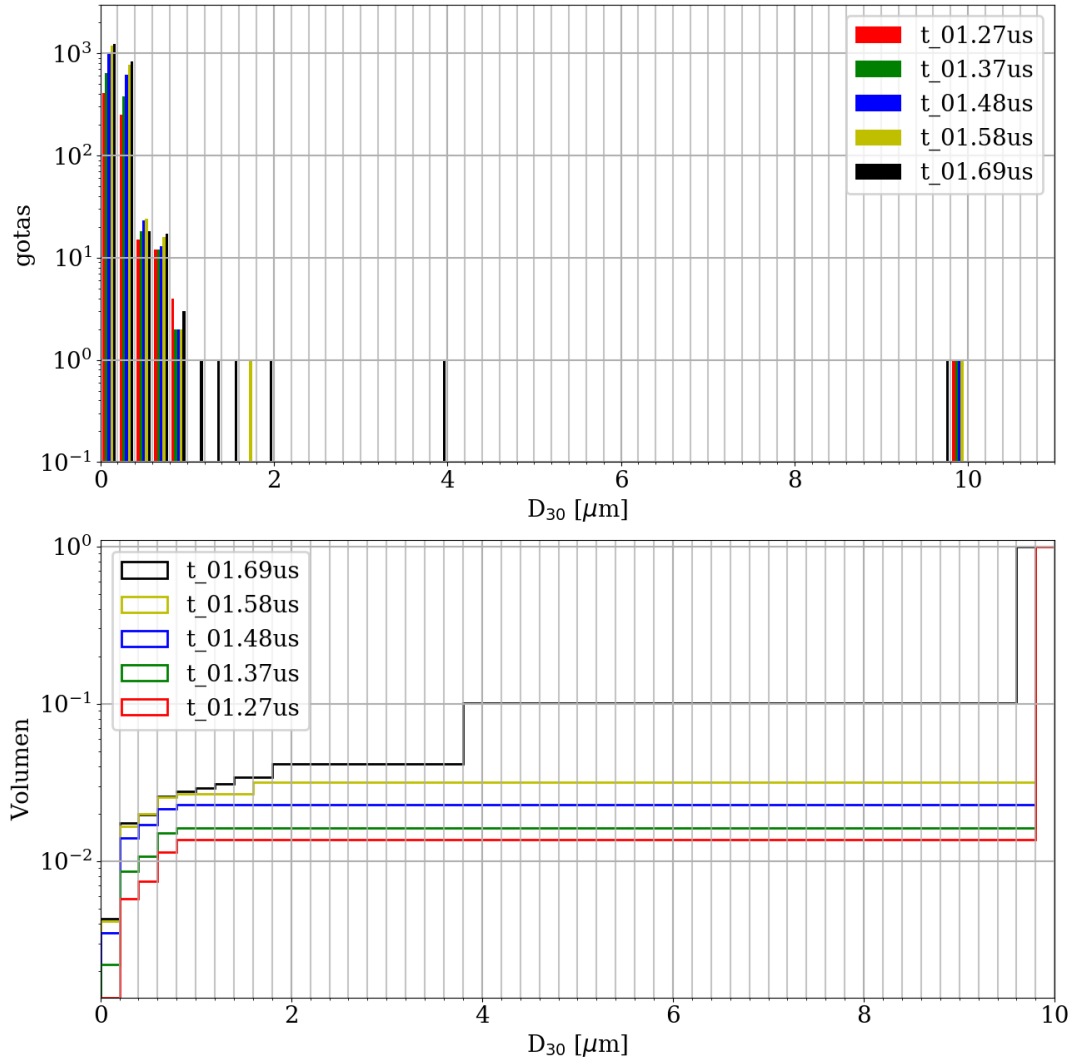


Figura 6.13: Distribución de tamaño de gotas en el proceso de atomización (arriba) y distribución acumulativa normalizada por volumen (abajo) para M-10-100.

principal presenta una acelerada pérdida de masa: transcurridos entre $0.7\mu\text{s}$ y $1.2\mu\text{s}$ la lámina reduce a menos de la mitad pasando de un $D_{30} \approx 8$ a $D_{30} \approx 6.4$. En cuanto a la distribución del volumen se observa que, para $t > 0.98\mu\text{s}$, casi el 50% del volumen se encuentra distribuido en forma exponencial entre 0.2 y $3\mu\text{m}$. A $t = 1.2\mu\text{s}$, la estructura principal retiene menos del 50% del volumen.

Además, la evolución de sus variables geométricas se detalla en los gráficos de la Figura 6.18. Puede observarse allí no sólo la rápida expansión, tanto en el sentido axial (L) como en el Radial (R), sino la considerable reducción del diámetro de Sauter, que alcanza, antes del *breakup*, valores inferiores al 20% del diámetro original. Este

grado de deformación implica que la gota se ha convertido en una lámina de espesor reducido, incrementando su densidad de superficie.

Cabe notar aquí que el número de Weber final, debido a la reducción de la velocidad relativa, es aproximadamente 20. A medida que la gota se deforma y reduce su velocidad relativa con respecto al gas, las condiciones se tornan más similares a las desarrolladas en el problema de atomización primaria. Al comenzar el proceso de fragmentación, la gota ha adquirido una deformación similar a las láminas desprendidas del chorro en los problemas de atomización primaria ($D_{32} \approx 0,5D_{30}$).

Sumario del análisis comparativo

En esta primera instancia de análisis, el objetivo fue hallar las condiciones de flujo que favorecen la atomización secundaria y el tiempo de *breakup* en cada caso. La evolución de las variables geométricas de cada gota en las Figuras 6.6, 6.8, 6.7 y 6.9 muestra que los problemas con número de Weber inferior a 20 se mantienen estables, deformándose oscilatoriamente hasta equilibrarse en una forma esférica. Más aún, un comportamiento similar se ha observado en casos con $We_g \approx 40$ (por ejemplo, A-20-50 y A-5-100); en estos casos el tiempo de simulación no es suficiente para observar la recuperación de la forma esférica, sin embargo la reducción de la velocidad relativa conduce a unas condiciones de flujo relativamente estables ($We_g \approx 8$). Un análisis comparativo de los tiempos característicos del problema muestra que los casos con

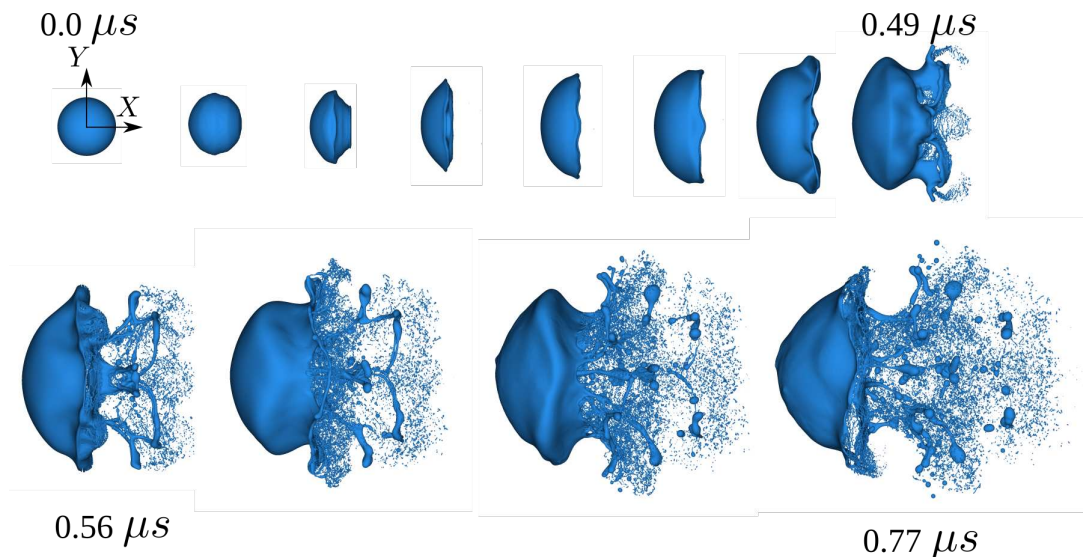


Figura 6.14: Progresión en vista lateral de deformación y fragmentación de la gota M-10-150. Intervalo de tiempo entre imágenes: $0.07\mu s$

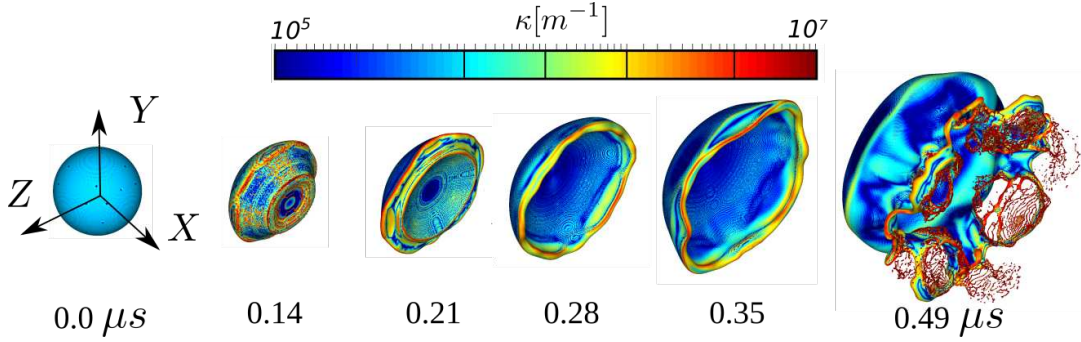


Figura 6.15: Progresión de la forma de la gota coloreada por curvatura (escala logarítmica) M-10-150.

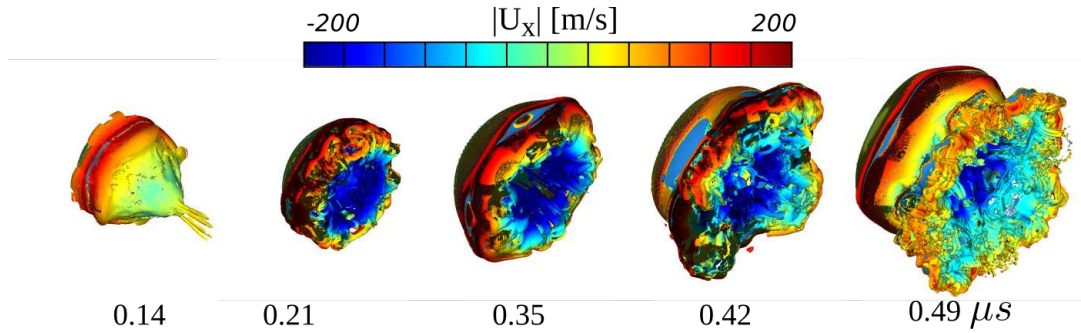


Figura 6.16: Progresión de las estructuras de vórtices y velocidad alrededor de la gota M-10-150.

relación $t_{aCC}/t_{RN} < 2,5$ presentan este proceso de *estabilización por desaceleración*, de forma que se mantienen estables aún para valores de $We_g \approx 20$.

Si bien en el contexto de atomización de chorros el flujo no es uniforme, manteniendo niveles de turbulencia elevados en la capa de mezcla inducida por el núcleo del chorro, las gotas eyectadas fuera de la capa de mezcla evolucionan en un flujo estanco. En ese contexto, es relevante analizar si los fenómenos de atomización Lagrangianos representan correctamente las evolución de los casos analizados en este capítulo.

6.5. Ajuste de modelos Lagrangianos de atomización secundaria

En el contexto de modelos DPM, las condiciones de atomización secundaria estudiadas en este capítulo corresponden a la región densa del *spray*. Por lo tanto, el modelo KH [143] debería representar correctamente el comportamiento de las gotas estudiadas.

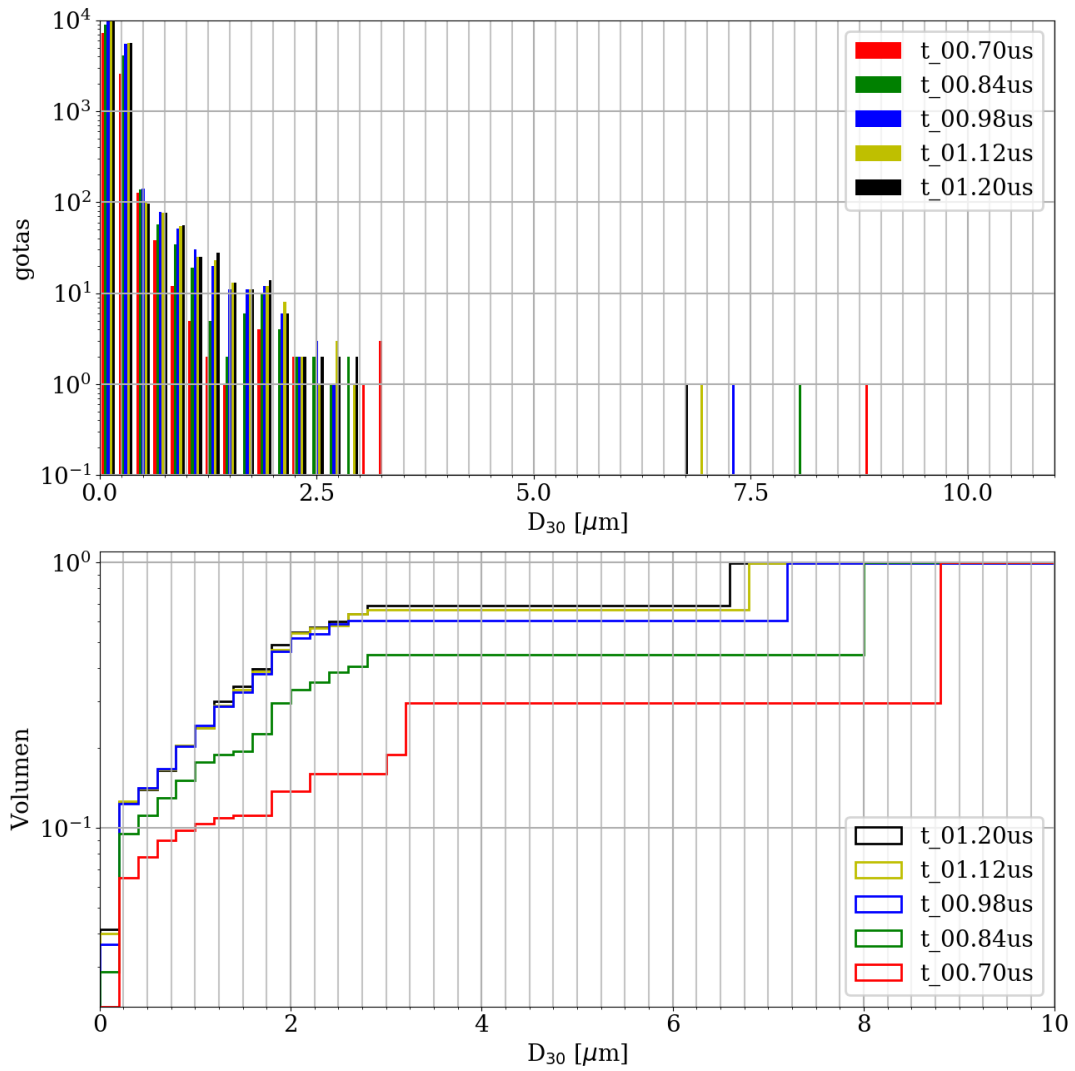


Figura 6.17: Distribución de tamaño de gotas en el proceso de atomización (arriba) y distribución acumulativa normalizada por volumen (abajo) para M-10-150.

6.5.1. Variables y parámetros de ajuste en el modelo KH

Como fue descrito en el capítulo 2, este modelo calcula la evolución de la superficie en función del crecimiento estimado para la inestabilidad Kelvin-Helmholtz (KH) [142, 193]. La variación del diámetro de la parcela y el diámetro característico d_{KH} se

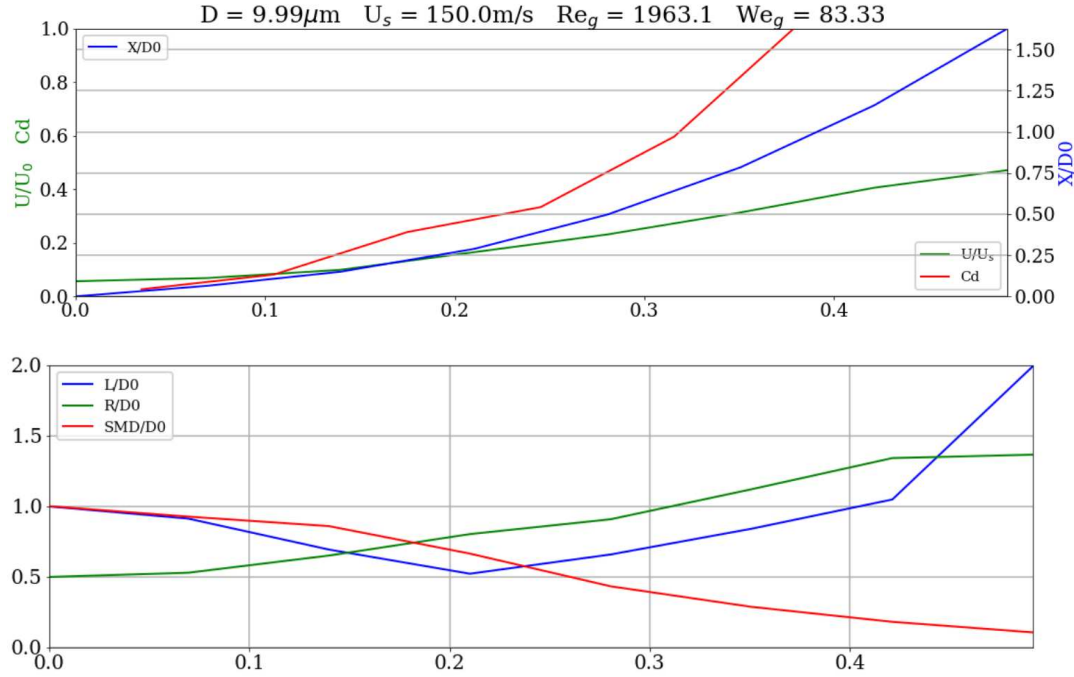


Figura 6.18: Evolución de la geometría de la gota en el caso M-10-150. Tiempo de *breakup*, aproximadamente $0.43 \mu s$

calculan de acuerdo a las Ecuaciones (2.41), (2.43), (2.44), así:

$$\frac{d(d_l)}{dt} = -\frac{d_0 - d_{KH}}{\tau_{KH}} \quad (d_{KH} \leq d_0),$$

$$d_{KH} = 2B_0 \Lambda_{KH}, \quad \tau_{KH} = \frac{3,788 B_1 d_0}{2 \Omega_{KH} \Lambda_{KH}},$$

$$\Lambda_{KH} = \frac{9,02 r_0 \left[\left(1 + 0,45 \sqrt{Z} \right) (1 + 0,4 T)^{0,7} \right]}{\left(1 + 0,865 We_g^{1,67} \right)^{0,6}}, \quad \Omega_{KH} = \frac{0,34 + 0,385 We_g^{1,5}}{(1 + Z)(1 + 1,4 T^{0,6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_l r_0^3}},$$

donde las constantes de ajuste B_0 y B_1 usualmente se fijan en $B_0 = 0,61$ y $B_1 = 7$. Por otra parte, la creación de la parcela hija se produce cuando $m_s > 3\%$, generando una parcela de gotas con diámetro d_{KH} de forma que

$$N = \frac{m_s}{\rho_l \Sigma \left(\frac{\pi}{6} d_{KH}^3 \right)}$$

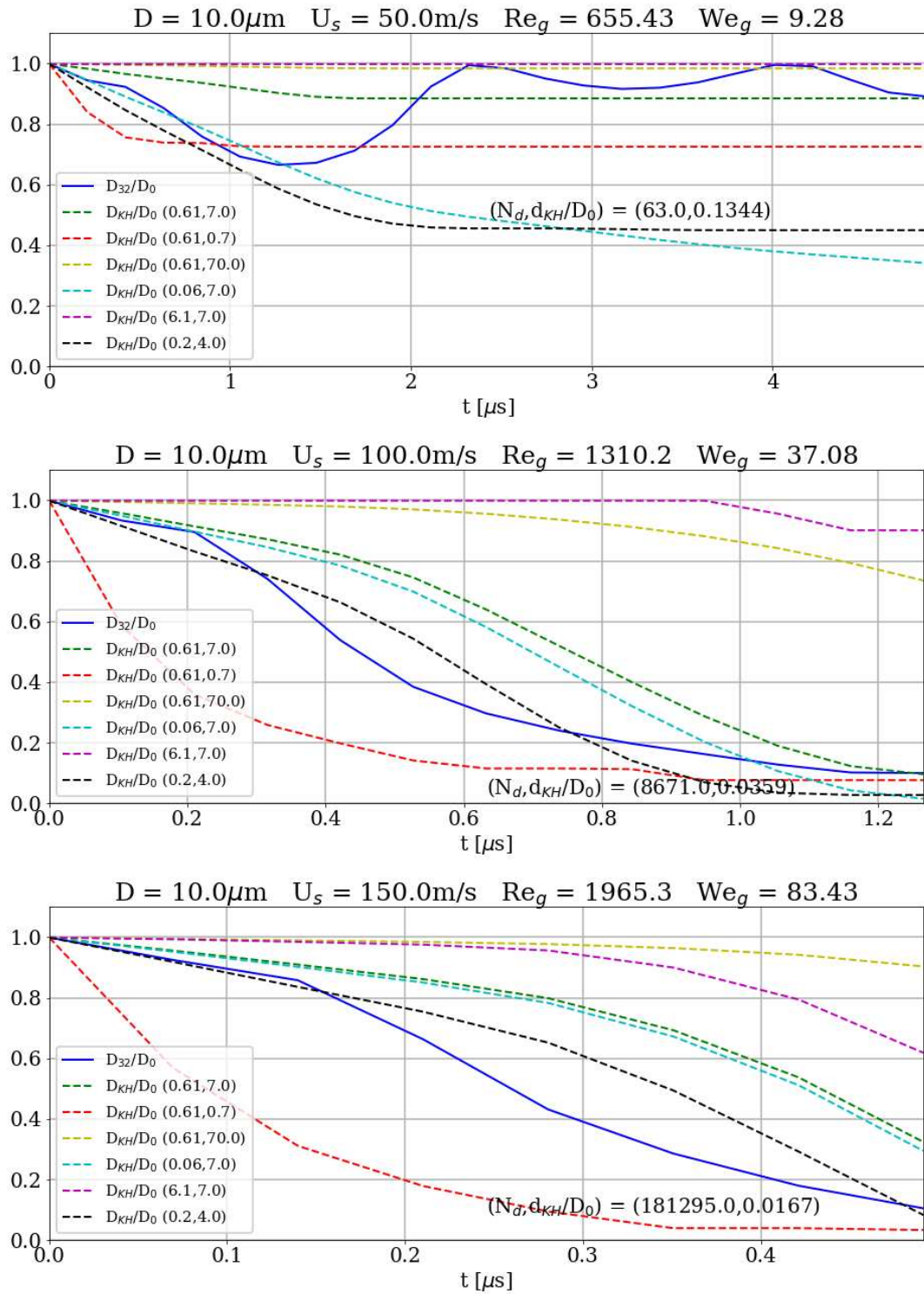


Figura 6.19: Evolución de D_{32} para M-10-50, M-10-100 y M-10-150, comparadas con predicciones de modelo Kelvin-Helmholtz

Empleando estas relaciones, se compara la evolución del D_{32} en los tres casos M de $10\ \mu\text{m}$ de diámetro con diversas combinaciones de las variables B_0 y B_1 . Los resultados se muestran en la Figura 6.19. El texto en el gráfico corresponde a la cantidad de celdas hijas (N_d) y al diámetro promedio de las mismas (d_{KH}) para el modelo ajustado con $B_0 = 0,2$, $B_1 = 4$. Si bien en los casos con atomización se logran ajustes razonables, el modelo KH original no permite representar la recuperación de la esfericidad estables. Más aún, al final de la evolución de M-10-50 se han generado 63 gotas de $1,3\ \mu\text{m}$ de diámetro. En el caso M-10-150 el tamaño promedio de gota ($d_{KH} = 0,16\ \mu\text{m}$) es similar al mínimo valor reportado en el histograma de la Figura 6.17, subestimando considerablemente el valor medio ($D_{30}(50\%Vol) = 1\ \mu\text{m}$).

De este primer análisis puede concluirse que el modelo KH tiene potencial para realizar predicciones precisas de la evolución del D_{32} en problemas de atomización secundaria, con algunas limitaciones. En primera instancia, no permite recuperación de forma en las gotas estables. Por otro lado, los diámetros de las gotas hijas son acordes a los valores mínimos observados en la simulación ILES, sin representar las gotas de mayor tamaño en el espectro atomizado.

6.5.2. Relación entre atomización y evaporación

Empleando los modelos de Baumgarten puede estimarse el tiempo de evaporación de una gota perfectamente esférica en una corriente uniforme [1, 10]. Considerando condiciones de flujo uniforme alrededor de una gota esférica con concentraciones fijas de aire y combustible, la tasa de evaporación de una gota puede estimarse como,

$$C_1 = -2D_{AB}\pi\log\left(\frac{1-Y_\infty}{1-Y_r}\right) \quad C_2 = 0,3\left(\frac{\Delta U}{v_g}\right)^{1/2}\left(\frac{D_{AB}}{v_g}\right)^{1/3}$$

$$K_1 = \frac{C_1}{3} \quad K_2 = C_2 K_1 \longrightarrow \frac{dd}{dt} = \frac{d}{K_1 + K_2\sqrt{d}}$$

$$t_{evap} = -2\frac{K_1^3}{K_2^4}\log\left(1 + \frac{K_2}{K_1}\sqrt{d}\right) + 2\frac{K_1^2}{K_2^3}\sqrt{d} - \frac{K_1}{K_2^2}d + 2\frac{d^{3/2}}{3K_2} \quad (6.7)$$

La Tabla 6.2 muestra los tiempos de evaporación total para algunas configuraciones presentes en los problema de atomización secundaria. Puede observarse que las gotas de diámetro menor a $3\ \mu\text{m}$ se evaporan en menos de $1\ \mu\text{s}$. Puede observarse que el tiempo de evaporación es en general mayor al de t_{RN} de la gota y que el tiempo total de evaporación es casi un orden de magnitud superior al de atomización. Por otra parte,

D [μm] V [m/s]	50	100	150	200
0.10	0,003	0,0029	0,0029	0,0028
0.50	0,07	0,065	0,062	0,06
1.25	0,35	0,3	0,28	0,26
2.5	1,23	1,06	0,96	0,88
5	4,23	3,53	3,14	2,87
10	14,6	11,5	10,05	9,1
20	46	36	31	28

Cuadro 6.2: Tiempos [μs] de evaporación total de gotas en diversas condiciones de flujo. Valores empleados para las constantes del modelo: $v_g = 1,8 \times 10^{-5} [\text{m}^2/\text{s}]$, $D_{AB} = 5 \times 10^{-6} [\text{cm}^2/\text{s}]$, $Y_\infty = 0$, $Y_r = 0,136$, .

el tiempo de evaporación de gotas inferiores a $0.5\mu\text{m}$ es muy reducido, menor por ejemplo a la diferencia entre los dos últimos cuadros de la Figura 6.14.

Esto implica que las gotas hijas producidas por el modelo de Kelvin-Helholtz deberían tener una vida muy corta, evaporándose antes de convertirse en una parcela *per-se*.

6.6. Sumario de atomización secundaria

Aún para las condiciones de flujo analizadas con mayor desarrollo de turbulencia, el modo de *breakup* que se desarrolla no alcanza niveles catastróficos. Para gotas de mayor tamaño ($D > 20\mu\text{m}$) se observa una erosión leve pero continua en la superficie, pero la estructura principal no pierde coherencia hasta que se produce una perforación.

Al comparar con el resto de los casos se observa que las gotas pequeñas ($D < 2,5\mu\text{m}$) no presentan atomización ni siquiera a las mayores velocidades desarrolladas en los problemas de atomización primaria. Tampoco sufren atomización las gotas medias ($5\mu\text{m}$) a velocidad bajas ($V < 50 \text{ m/s}$) sino que vuelven a un estado esférico.

En términos generales, se pueden señalarse las siguientes características del proceso de atomización secundaria:

- La relación de densidades en los problemas de inyección es relativamente reducida. En este régimen, las evoluciones son como [18, 19], la bolsa se forma en sentido opuesto.
- A medida que la gota sufre el efecto aerodinámico del aire se deforma y se acelera, reduciéndose la velocidad relativa y por lo tanto el número de Weber equivalente del problema. De esta manera, transcurrido un tiempo t_{ac} la estructura líquida alcanza condiciones de flujo estables.

- Las gotas de mayor número de Weber ($We_g > 100$) alcanzan condiciones de flujo correspondientes a un *stripping* que se desarrolla a partir de la perforación de la lámina. Asimismo, al alcanzar un tiempo característico inercial, la gota se perfora y desarrolla su atomización completa.
- Las gotas con número de Weber menor a 10 no sufren fragmentación. Se deforman y oscilan de manera que su diámetro efectivo se reduce, acelerando los procesos de transferencia debido al incremento de área.
- El tiempo de fragmentación es variado. En los dos casos multimodo estudiados la fragmentación ocurre a $t_{bu} < 2t_{RN}$
- Las predicciones Lagrangianas pueden ajustarse para replicar la tasa de cambio del diámetro de la gota principal, pero no logran describir la distribución de tamaños en la atomización con precisión.
- Sin embargo, fue verificado que en el contexto de simulación de motores las gotas de menor tamaños se evaporarán rápidamente.

Capítulo 7

Conclusiones

7.1. Sumario de tesis

Como principal aporte de esta tesis, se desarrollaron metodologías ILES que permiten un mayor control de la relación precisión-coste en la simulación de flujos multifásicos turbulentos. Mediante esta técnica se acota el error numérico a un rango predeterminado a la vez que se emplea el refinamiento adaptativo como medio para seleccionar las escalas turbulentas a modelar. Estos métodos fueron implementados en el entorno de software libre Basilisk.

Como segundo aporte relevante, se simuló la atomización de chorros en condiciones similares a la inyección de combustible en motores. De esta manera, pudo caracterizarse la evolución temporal de los fenómenos de fragmentación. En este proceso coexisten dos mecanismos de atomización simultáneos: el desprendimiento de gotas por esfuerzo de corte y el crecimiento de inestabilidades hidrodinámicas por efectos inerciales.

El desprendimiento por corte se encuentra fuertemente ligado al desarrollo de la turbulencia. Por lo tanto, se desarrolla en tiempos característicos reducidos y produce una gran cantidad de gotas cuyos diámetros son del mismo orden que las escalas turbulentas.

El crecimiento de inestabilidades por efectos inerciales, en cambio, transcurre en períodos de tiempo mayores y como resultado genera el desprendimiento de estructuras con tamaño comparable a la boquilla del inyector. Las láminas y ligamentos desprendidos se alejan del núcleo y, en algunos casos, sufren luego atomización secundaria por efectos aerodinámicos.

Mediante el análisis estadístico de la nube de gotas también se determinó la distribución de diámetros en la región de inyección, midiendo el ángulo de cono y la penetración.

Como tercer aporte, se realizó una caracterización más detallada de la fragmentación aerodinámica de gotas. En este contexto, se determinaron las condiciones de flujo en las cuales se produce la atomización secundaria, cuantificando su tiempo de desarrollo y el tamaño de las gotas en la nube resultante.

A partir de estos resultados pudo observarse que el tamaño de gotas es aún menor que el de las generadas por el desprendimiento por corte. A su vez, se contrastaron los tiempos característicos de fragmentación y la dispersión de diámetros con las predicciones dadas por los modelos de orden reducido utilizados usualmente en la simulación de aerosoles, dando como resultado una propuesta de ajuste para las constantes del modelo algebraico.

De esta manera, se ha observado que la interacción entre la turbulencia y las inestabilidades hidrodinámicas provoca el desarrollo simultáneo de diferentes mecanismos de fragmentación en un amplio espectro de escalas temporales y espaciales, relacionando la naturaleza multiescala de la atomización con su comportamiento caótico.

7.2. Contribuciones principales

Los aportes de este trabajo pueden clasificarse según contribuyan a la mejora de los métodos numéricos empleados en la simulación de flujos multifásicos turbulentos, al conocimiento físico de la atomización o al desarrollo de modelos para la simulación de motores.

7.2.1. Simulación de Flujos Multifásicos turbulentos

En este área, se realizaron los siguientes aportes:

- Se desarrollaron y validaron esquemas de advección *momentum-conserving* para el Método VOF en el contexto de FVM.
- Se definió e implementó una metodología ILES basada en estrategias de AMR para mallas *octree*.

7.2.2. Análisis físico de los procesos de atomización

En esta línea, se lograron los siguientes avances:

- Se llevaron a cabo simulaciones de alta resolución, describiendo los siguientes problemas de atomización:

- Inyección de un chorro cilíndrico en gas estanco
- Fragmentación aerodinámica de una gota esférica en un flujo uniforme
- Se estudió la evolución de las estructuras de flujo en cada caso, caracterizando los aerosoles obtenidos y la dinámica de generación de gotas.
- Se caracterizaron los tiempos de evolución y los diámetros de gotas para nubes generadas en condiciones relevantes a la inyección de combustible en motores.

7.2.3. Modelos de inyección para la simulación de motores

Finalmente, respecto al ajuste de los modelos algebraicos de atomización en el marco de DPM:

- Se contrastó la tasa de atomización resultante de las simulaciones ILES con las predicciones de los modelos de atomización primaria.
- Se propuso una metodología de ajuste para las constantes empíricas basada en problemas simplificados de atomización secundaria.
- Se analizó la validez de los modelos de fragmentación en regímenes de flujo a bajo número de Weber.

7.3. Trabajos complementarios y prospectivas

En relación a los temas expuestos en esta tesis, se mencionan a continuación otros trabajos vinculados a los métodos empleados en la simulación CFD.

7.3.1. Aportes relacionados a los métodos numéricos

Respecto a la formulación fundamental de las técnicas numéricas,

- Se estudió la estabilidad de los algoritmos segregados para acoplamiento presión-velocidad (PISO-SIMPLE) [181, 182].
- Se propusieron e implementaron correcciones a estos algoritmos para atenuar oscilaciones numéricas en casos con gran discontinuidad de propiedades [2].
- Se definieron e implementaron en OpenFOAM® los algoritmos geométricos necesarios para un *solver* VOF-PLIC *unsplit* en mallas arbitrarias, estudiando el error numérico de esta formulación [152, 117].

7.3.2. Aportes a los códigos de simulación empleados

Respecto a las herramientas computacionales desarrolladas durante este doctorado pueden dividirse en aportes a los *software* empleados:

- En Basilisk se implementaron ó validaron:
 - Esquemas de advección *momentum-conserving* que reducen la transferencia espuria de momento entre fases.
 - Herramientas de caracterización *on-line* de atomización.
 - Indicadores *on-line* de error numérico.
 - Estrategias de refinamiento basadas en indicadores de disipación numérica.
- En OpenFOAM® se implementaron y validaron:
 - Corrección PISO con filtro de oscilaciones numéricas, basada en reconstrucción.
 - Algoritmos de reconstrucción geométrica de interfase para mallas no estructuradas
 - Algoritmos de advección geométrica *unsplit*, con corrección iterativa de flujos.

7.3.3. Trabajos a futuro

Como continuación de este proyecto de investigación, se espera extender el estudio realizado para regímenes de atomización con mayor intensidad de turbulencia, a fin de representar condiciones más cercanas a la inyección en motores.

A su vez, se espera extender la caracterización de nubes de gotas con dichos casos para aplicar un proceso de ajuste de modelos DPM más extensivo.

Dado que los costos computacionales de dicho estudio serían considerablemente elevados, una alternativa para reducirlos sería desarrollar modelos subgrilla de representación de la interfase (ELSA) a partir de los cuales podría implementarse un simulador que permita la coexistencia de todos los niveles de modelado desde la Simulación Numérica Directa empleando VOF a modelos de turbulencia con representación ELSA o DPM de la fase dispersa.

Esta herramienta permitiría realizar análisis similares a los de esta tesis de forma sistemática, utilizando un único entorno de programación. Dicho software sería aplicable a una gran cantidad de problemas industriales: producción de fármacos, aplicación de agroquímicos, impresión 3D, recubrimiento de superficies, procesos de acondicionamiento de atmósfera, entre otras.

Apéndice A

Solver de flujo compresible

A.1. Ecuaciones de gobierno

El flujo a resolver dentro del motor de pistones opuestos es compresible y está sujeto a grandes transferencias de energía debido a la combustión y el trabajo mecánico. El flujo es gobernado por las ecuaciones de Navier-Stokes compresibles, la ecuación de conservación de la energía y una ecuación de estado:

- Conservación de la cantidad de movimiento:

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho uu) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho g \quad (\text{A.1})$$

- Conservación de masa:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (\text{A.2})$$

- Conservación de energía:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho eu) = -\nabla \cdot q - \nabla \cdot (pu) - \nabla \cdot (\tau \cdot u) \quad (\text{A.3})$$

- Ecuación de estado:

$$p = \rho RT \quad (\text{A.4})$$

donde τ es el tensor de tensiones, g es la aceleración de la gravedad, q es el vector del flujo de energía y R es la constante de gas ideal. Las ecuaciones definidas previamente generan un sistema indeterminado con más incógnitas que ecuaciones. Para resolver esta indeterminación se definen relaciones constitutivas para el tensor de tensiones τ y el flujo de calor q :

- El tensor de tensiones τ se modela por medio de la ley de viscosidad de Newton,

$$\tau = \mu \left[\nabla u + (\nabla u^T) \right] + \frac{2}{3} \mu (\nabla \cdot u) I \quad (\text{A.5})$$

donde μ es la viscosidad dinámica del fluido e I es el tensor identidad.

- El flujo de calor q se determina por medio de la ley de Fourier,

$$\mathbf{q} = -k \nabla T, \quad (\text{A.6})$$

siendo k la conductividad térmica del medio fluido.

A.1.1. Resolución numérica de las ecuaciones de gobierno

La determinación de las incógnitas de un problema de flujo compresible se resuelve por medio de los balances de momento, masa, energía, de la ecuación de estado de los gases ideales y las relaciones constitutivas. Mediante todas estas ecuaciones se determinan las incógnitas principales del problema las cuales son la velocidad u , la presión p , la energía interna e y la densidad ρ . El conjunto de cuatro incógnitas y cuatro ecuaciones es un sistema determinado fuertemente acoplado. Por otro lado, las ecuaciones presentan relaciones no lineales de las incógnitas del problema.

Para resolver el sistema definido por las ecuaciones de gobierno se propone un método iterativo. En cada iteración se discretizan las ecuaciones de balance como combinación lineal de una de las incógnitas en donde los términos no lineales y aquellos que dependen del resto de las incógnitas se asumen como constantes e iguales al valor de la iteración previa. Entonces, los balances se resuelven sucesivamente hasta reducir el error por debajo de una cierta tolerancia. En este punto el método iterativo concluye o converge.

En detalle, el acople entre las incógnitas se basa en una combinación de los métodos SIMPLE [124] y PISO [68] denominado como PIMPLE [49]. Se definen dos bucles iterativos anidados: un bucle externo, bucle SIMPLE y otro interno, bucle PISO. Ambos bucles se disponen a su vez dentro de un tercer bucle externo encargado de avanzar temporalmente. Con el fin de identificar el número de iteración dentro de los bucles SIMPLE y PISO se utilizan los supra-índices i y j respectivamente. A continuación, en el Algoritmo 2, se describe el orden en que se resuelven las ecuaciones definiendo la incógnita resuelta en cada balance.

En el bucle SIMPLE se resuelve el balance de momento. Esta ecuación posee términos que se deben aproximar como constantes para poder determinar un sistema de ecuaciones lineales en la incógnita velocidad. Por un lado, se encuentra el término

Algorithm 2: Esquema de acople entre los balances de momento, masa y energía utilizando un *solver* basado en los métodos SIMPLE y PISO.

■ Bucle Temporal

- Actualización de la malla:
 $u_b^{n-1} \rightarrow u_b^n$
 - Bucle SIMPLE, iteración i :
 - Balance de momento:
 $u^{i-1} \rightarrow u^i$
 - Bucle PISO, iteración j :
 - ◊ Balance de masa:
 $p^{j-1} \rightarrow p^j$
 - ◊ Ecuación de estado:
 $\rho^{j-1} \rightarrow \rho^{j-1/2}$
 - ◊ Balance de momento:
 $u^{j-1} \rightarrow u^j$
 - ◊ Balance de energía:
 $h^{j-1} \rightarrow h^j$
 - ◊ Ecuación de estado:
 $\rho^{j-1/2} \rightarrow \rho^j$
-

convectivo que es no lineal respecto a la velocidad y por otro lado se encuentran las incógnitas presión y densidad. En este contexto, el término convectivo se linealiza adoptando el último valor disponible de la velocidad $u^{(i-1)}$. De la misma manera, la presión y la densidad se computan con sus valores disponibles $p^{(i-1)}$ y $\rho^{(i-1)}$ respectivamente. Considerando estas aproximaciones el balance de momento expresado sobre una celda P_i resulta como:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{P_i} \rho^{(i-1)} u^{(i)} dV + \int_{\partial P_i} \rho^{(i-1)} u^{(i)} \left[\left(u^{(i-1)} - v_\Gamma \right) \cdot dS \right] + \int_{\partial P_i} \tau(\mu, \nabla u)^{(i)} \cdot dS \\ = - \int_{P_i} \nabla p^{(i-1)} dV \quad \forall P_i \in \Omega \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Esta ecuación se discretiza por el método de volúmenes finitos llegando a la siguiente expresión para cada celda de la malla,

$$a_P u_P^i + \sum_N a_N u_N^i = b \quad \forall P \in \Omega \quad (\text{A.8})$$

en donde el subíndice N representa las celdas vecinas a la celda P . En la Ec. (A.8) los coeficientes a_P , a_N son función de la densidad $\rho^{(i-1)}$ y del valor de velocidad de la iteración previa $u^{(i-1)}$, y por su lado, el vector del término independiente b depende, además, de la presión $p^{(i-1)}$,

$$\begin{aligned} a_P &= f(\rho^{(i-1)}, u^{(i-1)}) \\ a_N &= f(\rho^{(i-1)}, u^{(i-1)}) \\ b &= f(\rho^{(i-1)}, u^{(i-1)}, p^{(i-1)}). \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

Una vez resuelto la ecuación de momento y determinado el nuevo campo de velocidades u^i se ingresa al bucle interior del algoritmo o bucle PISO. En este bucle se acopla la velocidad con la presión, densidad y temperatura resolviendo los balances de masa, momento y energía. La presión se determina a partir de resolver el balance de masa,

$$\frac{d}{dt} \int_{P_i} \rho dV + \int_{\partial P_i} \rho u \cdot dS = 0 \quad \forall P_i \in \Omega \quad (\text{A.10})$$

Este balance se expresa en función de la presión sustituyendo la densidad y la velocidad por expresiones que dependen de la presión. La densidad se relaciona con la presión por medio de la ecuación de estado de los gases ideales,

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (\text{A.11})$$

Si se considera el último valor disponible para la temperatura $T^{(j-1)}$, la relación entre la densidad y la presión se linealiza por medio del factor de compresibilidad $\psi = 1/(RT)$,

$$\rho = \psi^{j-1} p = \frac{p}{RT^{(j-1)}} \quad (\text{A.12})$$

Por otro lado, la relación entre la velocidad y la presión se define a partir del balance de momento. Se define una versión semidiscreta del balance de momento similar a la Ec. (A.8) separando del término b el gradiente de presión,

$$a_P u_P^{(j-1)} + \sum a_N u_N^{(j-1)} = -\nabla p_P + b^0 \quad \forall P \in \Omega \quad (\text{A.13})$$

en donde b^0 representa el término independiente del balance de momento exceptuando la contribución del gradiente de presión. Se agrupan las contribuciones de las celdas vecinas N y el término independiente b^0 por medio de un nuevo término denominado $H(u)$,

$$H[u^{(j-1)}] = -\sum a_N u_N^{(j-1)} + b^0. \quad (\text{A.14})$$

Luego de incluir la Ec. (A.14) en (A.13) se puede expresar la velocidad en la celda P en función de la presión,

$$u_p = -\frac{\nabla p}{a_p} + \frac{H(u)}{a_p} \quad (\text{A.15})$$

Luego se reemplaza la densidad y velocidad por sus equivalentes funciones de la presión dadas en (A.12) y (A.15) y se las incluye en el balance de masa definido en (A.10):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{P_i} \psi^{(j-1)} p^{(j)} dV + \int_{\partial P_i} p^{(j)} \left\{ \left[\frac{\psi^{(j-1)}}{a_p} H(u^{(j-1)}) - v_\Gamma \right] \cdot dS \right\} \\ - \int_{\partial P_i} \frac{\rho^{(j-1)}}{a_p} (\nabla p^{(j)} \cdot dS) = 0 \quad \forall P_i \in \Omega. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

La relación entre velocidad y presión definida en la Ec. (A.15) se debe interpolar sobre las caras de las celdas para discretizar el término convectivo de la Ec. (A.16). En el término difusivo, se utiliza un valor conocido de la densidad. Una vez resuelta la ecuación de presión se define la velocidad en las caras de la malla a partir de la ecuación algebraica de momento (A.15):

$$u_k^{(j)} = \left[\frac{H(u)^{(j-1)}}{a_p} \right]_k - \left[\frac{\nabla p^{(j)}}{a_p} \right]_k \quad (\text{A.17})$$

en donde el gradiente de presión del segundo término se computa por medio de un *stencil* compacto usando valores de celdas adyacentes a la cara [74]. Proyectando los valores de velocidad de la Ec. (A.17) con el normal de cada cara se obtienen los flujos necesarios para resolver la discretización de los términos convectivos de las ecuaciones de transporte,

$$\phi_k = u_k \cdot S_k. \quad (\text{A.18})$$

De forma análoga a la Ec. (A.17) se definen los valores de velocidad en celdas,

$$u_p^{(j)} = \frac{H(u)^{(j-1)}}{a_p} - \frac{\nabla p^{(j)}}{a_p}. \quad (\text{A.19})$$

Una vez actualizada la velocidad se define la energía cinética,

$$E_c^{(j)} = \frac{u^{(j)} \cdot u^{(j)}}{2}. \quad (\text{A.20})$$

Posteriormente se actualiza el valor de la densidad previo a resolver el balance de energía,

$$\rho^{(j-1/2)} = \psi^{(j-1)} p^{(j)}. \quad (\text{A.21})$$

La ecuación de energía se plantea en términos de la entalpía h . El balance resuelto es el siguiente,

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \int \rho (h + E_c) dV + \int_{\partial P_i} (h + E_c) \left[\left(u^{(j)} - v_\Gamma \right) \cdot ds \right] - \int_{\partial P_i} \alpha \nabla h^{(j)} \cdot ds \\ & = \\ & \frac{d}{dt} \int_{P_i} p dV - \int_{\partial P_i} p v_\Gamma^n \cdot ds \end{aligned} \quad \forall P \in \Omega. \quad (\text{A.22})$$

Una vez actualizada la entalpía se calcula el nuevo valor de temperatura $T^{(j)}$ y en consecuencia se actualizan los valores de la compresibilidad $\psi^{(j)}$ y de la densidad $\rho^{(j)}$,

$$\begin{aligned} T^{(j)} &= C_p h^{(j)}, \\ \psi^{(j)} &= \frac{1}{R T^{(j)}}, \\ \rho^{(j)} &= \psi^{(j)} p^{(j)}. \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

Apéndice B

Implentación de VOF algebraico

Debido a la complejidad de los esquemas geométricos de advección, se han desarrollado correcciones para reducir el error difusivo de los esquemas algebraicos. Si bien estorepresentaciones de la interfase. Una de las posibilidades, explorada en esta sección del informe, es emplear esquemas de advección basados en operaciones geométricas y reconstrucciones de interfase de mayor orden.

Las bases del método se encuentran descritas en [188]. El trabajo más reciente de [13], presenta más detalles respecto a la implementación en OpenFOAM®.

En [102], se lleva a cabo un análisis más general, estudiando la técnica en un contexto de modelo de mezcla. A su vez, se presentan las principales características del algoritmo *interFoam*, que emplea un esquema de VOF algebraico junto con el algoritmo PISO para resolver flujos incompresibles a dos fases.

En [31] el mismo algoritmo es analizado mediante algunos problemas benchmark. Una de las principales conclusiones de este artículo es que el uso de esquemas algebraicos de advección introduce un error difusivo muy significativo, aún empleando esquemas de alta resolución y velocidades compresivas.

Modelo matemático

A continuación se describe el modelo VOF siguiendo la filosofía del modelo de mezcla. Como en todos los métodos de *interface-tracking*, se emplea una función fracción de volumen α para representar la proporción de cada fase que ocupa una celda dada.

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}\alpha) = 0 \quad \left[\alpha = \frac{\text{Volumen de fluido en celda}}{\text{Volumen total en celda}} \right] \quad (\text{B.1})$$

Considerando que no existe transferencia de masa entre fases, sólo el transporte advectivo afecta a la función α , siendo su ecuación de transporte la dada en B.1, donde \mathbf{U} es la velocidad de la mezcla.

Para el caso de dos fases fluidas, q y p , la suma de las fracciones másicas siempre será 1, dando la relación $\alpha_p = (1 - \alpha_q)$.

La dinámica de la mezcla fluida se encuentra regida por las ecuaciones de conservación de masa cantidad de movimiento. Si se consideran ambas fases en flujo incompresible e isotérmico, las ecuaciones de Navier-Stokes aplicadas al sistema de dos fluidos pueden emplearse para describir el flujo.

Siguiendo los desarrollos en [102], el sistema de ecuaciones a resolver para un sistema bifásico es el dado en B.2.

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho_m \mathbf{v}_m}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{v}_m \otimes \mathbf{v}_m) = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\mu \nabla \mathbf{v}_m + (\nabla \mathbf{v}_m)^T \right) \\ \quad + \rho_m \mathbf{g} - \nabla \cdot \left(\alpha_q (1 - \alpha_q) \frac{\rho_q \rho_p}{\rho_m} \mathbf{v}_{qp} \otimes \mathbf{v}_{qp} \right) + \sigma \kappa \nabla \alpha \\ \frac{\partial \alpha_q}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \alpha_q) + \nabla \cdot (\alpha_q (1 - \alpha_q) \mathbf{v}_{qp}) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{B.2})$$

Donde se encuentran empleadas las siguientes variables:

- Densidad de mezcla: $\rho_m = \alpha_q \rho_q + (1 - \alpha_q) \rho_p$.
- Viscosidad de mezcla: $\mu_m = \alpha_q \mu_q + (1 - \alpha_q) \mu_p$.
- Velocidad de centro de masa: $\mathbf{v}_m = \frac{\alpha_q \rho_q \mathbf{v}_q + (1 - \alpha_q) \rho_p \mathbf{v}_p}{\rho_m}$.
- Velocidad de centro de volumen: $\mathbf{u} = \alpha_q \mathbf{v}_q + (1 - \alpha_q) \mathbf{v}_p$.
- Velocidad relativa: $\mathbf{v}_{qp} = \mathbf{v}_q - \mathbf{v}_p$.

El último término de la segunda ecuación corresponde al efecto de la fuerza de tensión superficial, usualmente no se incluído en los modelos de mezcla debido a que éstos no cuentan con una descripción geométrica y ésta fuerza sólo puede computarse conociendo la curvatura κ de la superficie libre.

La fuente de momentum derivada del deslizamiento entre interfases (cuarto término derecho) no existe en las formulaciones de trackeo de interfases, dado que los estos modelos suponen que la superficie entre fases se resuelve a nivel DNS. Si ese fuese el caso, se guardarían las siguientes relaciones:

$$\mathbf{v}_{qp} = \mathbf{0} \quad \mathbf{v}_m = \mathbf{u}$$

Por otra parte, la presión suele modificarse de acuerdo a la expresión siguiente:

$$\begin{aligned} p_{rgh} &= p - \rho_m \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \\ \nabla p_{rgh} &= \nabla p - \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m - \rho_m \mathbf{g} \\ -\nabla p + \rho_m \mathbf{g} &= -\nabla p_{rgh} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

La ventaja de emplear esta formulación consiste en operar sobre un campo de presiones suave, restringiendo las discontinuidades generadas por el cambio de fase a la densidad de la mezcla.

Bajo estas condiciones, las ecuaciones planteadas son equivalentes al sistema propuesto por Weller B.4 e implementado en el solver `interFoam`.

Cabe notar que el último término en la ecuación de transporte de α_q suele retenerse a pesar de que la velocidad relativa entre fases se supone nula. La razón de esta práctica es emplear este término para mejorar la precisión del esquema de advección. El uso de la velocidad compresiva reduce los errores difusivos preservando el carácter discontinuo de la interfase.

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \cdot (\mathbf{u}) = 0 \\ \frac{\partial \rho_m \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = -\nabla p_{rgh} + \nabla \cdot \left(\mu \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T \right) \\ \quad \quad \quad - \mathbf{g} \cdot \mathbf{x} \nabla \rho_m + \sigma \kappa \nabla \alpha \\ \frac{\partial \alpha_q}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u} \alpha_q) + \nabla \cdot (\alpha_q (1 - \alpha_q) \mathbf{v}_{qp}) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{B.4})$$

Cabe notar que el cálculo de la curvatura κ se lleva a cabo a partir del campo α como se indica en la ecuación B.5. Por ende, la precisión con la que se aproxime la fuerza de tensión superficial dependerá fuertemente del esquema numérico empleado en la advección de α .

$$\kappa = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha}{\|\nabla \alpha\|} \right) \quad (\text{B.5})$$

Bibliografía

- [1] Aguerre, H. J. (2018). *Simulación de la inyección directa de combustible en motores de combustión interna*. PhD thesis, Universidad Nacional del Litoral, Argentina.
- [2] Aguerre, H. J., Pairetti, C. I., Venier, C. M., Damián, S. M., and Nigro, N. M. (2018). An oscillation-free flow solver based on flux reconstruction. *Journal of Computational Physics*, 365:135–148.
- [3] Anez, J., Puggelli, S., Hecht, N., Andreini, A., Reveillon, J., and Demoulin, F. (2019). Liquid atomization modeling in openfoam (r). In *OpenFOAM(R)*, pages 297–308. Springer.
- [4] Aniszewski, W. (2011). *Large Eddy Simulation of Turbulent two-phase flow*. PhD thesis, Czestochowa University of Technology.
- [5] ANSYS, F. (2006). Fluent user’s manual. *Software release*, 13.
- [6] Artana, G., Romat, H., and Touchard, G. (1998). Theoretical analysis of linear stability of electrified jets flowing at high velocity inside a coaxial electrode. *Journal of electrostatics*, 43(2):83–100.
- [7] Aulisa, E., Manservigi, S., Scardovelli, R., and Zaleski, S. (2003). A geometrical area-preserving volume-of-fluid advection method. *Journal of Computational Physics*, 192(1):355–364.
- [8] Bagué, A. (2008). *Simulation numérique de l’atomisation en maillage adaptatif hiérarchique*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie.
- [9] Batchelor, G. K. (2000). *An introduction to fluid dynamics*. Cambridge university press.
- [10] Baumgarten, C. (2006). *Mixture formation in internal combustion engines*. Springer Science & Business Media.
- [11] Beale, J. C. and Reitz, R. D. (1999). Modeling spray atomization with the Kelvin-Helmholtz/Rayleigh-Taylor hybrid model. *Atomization and sprays*, 9(6).
- [12] Bell, J. B., Colella, P., and Glaz, H. M. (1989). A second-order projection method for the incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 85(2):257–283.
- [13] Berberović, E., van Hinsberg, N. P., Jakirlić, S., Roisman, I. V., and Tropea, C. (2009). Drop impact onto a liquid layer of finite thickness: Dynamics of the cavity evolution. *Physical Review E*, 79(3):036306.

- [14] Bianchi, G., Pelloni, P., Corcione, F., Allocca, L., and Luppino, F. (2001). Modeling atomization of high-pressure diesel sprays. *Journal of engineering for gas turbines and power*, 123(2):419–427.
- [15] Boris, J., Grinstein, F., Oran, E., and Kolbe, R. (1992). New insights into large eddy simulation. *Fluid dynamics research*, 10(4-6):199–228.
- [16] Brackbill, J., Kothe, D. B., and Zemach, C. (1992). A continuum method for modeling surface tension. *Journal of computational physics*, 100(2):335–354.
- [17] Cadieux, F., Sun, G., and Domaradzki, J. A. (2017). Effects of numerical dissipation on the interpretation of simulation results in computational fluid dynamics. *Computers & Fluids*, 154:256–272.
- [18] Castrillon Escobar, S. (2015). Direct numerical simulations of hydrodynamic fragmentation of liquid metal droplets by a water flow. In *13th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*.
- [19] Castrillon Escobar, S. (2016). Direct numerical simulations of hydrodynamic fragmentation of liquid metal droplets. In *27th Annual Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*.
- [20] Cheng, Y., Lee, T., Low, H., and Tao, W. (2007a). An efficient and robust numerical scheme for the simpler algorithm on non-orthogonal curvilinear coordinates: Clearer. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 51(5):433–461.
- [21] Cheng, Y., Lee, T., Low, H., and Tao, W. (2007b). An efficient and robust numerical scheme for the SIMPLER algorithm on non-orthogonal curvilinear coordinates: CLEARER. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 51(5):433–461.
- [22] Chesnel, J., Menard, T., Reveillon, J., and Demoulin, F.-X. (2011). Subgrid analysis of liquid jet atomization. *Atomization and Sprays*, 21(1).
- [23] Chorin, A. J. (1967). The numerical solution of the Navier-Stokes equations for an incompressible fluid. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 73(6):928–931.
- [24] Chorin, A. J. (1968). Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104):745–762.
- [25] Clark, C. and Dombrowski, N. (1972). Aerodynamic instability and disintegration of inviscid liquid sheets. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 329(1579):467–478.
- [26] Conti, J., Holtberg, P., Diefenderfer, J., LaRose, A., Turnure, J. T., and Westfall, L. (2016). International energy outlook 2016 with projections to 2040. Technical report, USDOE Energy Information Administration (EIA), Washington, DC (United States). Office of Energy Analysis.
- [27] Corzo, S. F. (2015). *Assessment of nuclear power reactor using computational fluid dynamics*. PhD thesis, Universidad Nacional del Litoral.
- [28] Crank, J. and Nicolson, P. (1947). A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, volume 43, pages 50–67. Cambridge University Press.

- [29] Da Vinci, L. (2012). *The notebooks of Leonardo da Vinci*, volume 1. Courier Corporation.
- [30] Dent, J. (1971). A basis for the comparison of various experimental methods for studying spray penetration. *SAE Transactions*, pages 1881–1884.
- [31] Deshpande, S. S., Anumolu, L., and Trujillo, M. F. (2012). Evaluating the performance of the two-phase flow solver interfoam. *Computational science & discovery*, 5(1):014016.
- [32] Desjardins, O., Pitsch, H., et al. (2010). Detailed numerical investigation of turbulent atomization of liquid jets. *Atomization and Sprays*, 20(4):311.
- [33] Donea, J. and Huerta, A. (2003). *Finite element methods for flow problems*. John Wiley & Sons.
- [34] Drew, D. A. (1982). Continuum modeling of two-phase flows. Technical report, DTIC Document.
- [35] Dukowicz, J. K. (1980). A particle-fluid numerical model for liquid sprays. *Journal of computational physics*, 35(2):229–253.
- [36] Dumouchel, C. (2008). On the experimental investigation on primary atomization of liquid streams. *Experiments in fluids*, 45(3):371–422.
- [37] Dumouchel, C., Aniszewski, W., Vu, T.-T., and Ménard, T. (2017). Multi-scale analysis of simulated capillary instability. *International Journal of Multiphase Flow*, 92:181–192.
- [38] Eggers, J. and Villermaux, E. (2008). Physics of liquid jets. *Reports on progress in physics*, 71(3):036601.
- [39] EMEP, E. (2016). Eea air pollutant emission inventory guidebook 2016. *European Environment Agency, Copenhagen*.
- [40] Emission standards (2018). European emission standards. <https://www.dieselnr.com/standards/eu/ld.php>.
- [41] Engine Combustion Network (2017). Engine Combustion Network. <https://ecn.sandia.gov/>.
- [42] European-emission-standards (2018). European emission standards. https://en.wikipedia.org/wiki/European_emission_standards.
- [43] Faeth, G., Hsiang, L.-P., and Wu, P.-K. (1995). Structure and breakup properties of sprays. *International Journal of Multiphase Flow*, 21:99–127.
- [44] Ferziger, J. and Peric, M. (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer.
- [45] Francois, M. M., Cummins, S. J., Dendy, E. D., Kothe, D. B., Sicilian, J. M., and Williams, M. W. (2006). A balanced-force algorithm for continuous and sharp interfacial surface tension models within a volume tracking framework. *Journal of Computational Physics*, 213(1):141–173.

- [46] Frossling, N. (1938). Über die verdunstung fallender tropfen. *Beitr. Geophys. Gerlands*, 52:170–216.
- [47] Fuster, D., Bagué, A., Boeck, T., Le Moyne, L., Leboissetier, A., Popinet, S., Ray, P., Scardovelli, R., and Zaleski, S. (2009). Simulation of primary atomization with an octree adaptive mesh refinement and vof method. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(6):550–565.
- [48] Fuster, D., Matas, J.-P., Marty, S., Popinet, S., Hoepffner, J., Cartellier, A., and Zaleski, S. (2013). Instability regimes in the primary breakup region of planar coflowing sheets. *Journal of Fluid Mechanics*, 736:150–176.
- [49] Gatin, I., Vukčević, V., Jasak, H., and Rusche, H. (2017). Enhanced coupling of solid body motion and fluid flow in finite volume framework. *Ocean engineering*, 143:295–304.
- [50] Germano, M., Piomelli, U., Moin, P., and Cabot, W. H. (1991). A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3(7):1760–1765.
- [51] Ghiji, M., Goldsworthy, L., Brandner, P., Garaniya, V., and Hield, P. (2017). Analysis of diesel spray dynamics using a compressible eulerian/vof/les model and microscopic shadowgraphy. *Fuel*, 188:352–366.
- [52] Giménez, J. M. (2015). *Enlarging time-steps for solving one and two phase flows using the Particle Finite Element Method*. PhD thesis, Universidad Nacional del Litoral.
- [53] Gorokhovski, M. and Herrmann, M. (2008). Modeling primary atomization. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 40:343–366.
- [54] Guildenbecher, D., López-Rivera, C., and Sojka, P. (2009). Secondary atomization. *Experiments in Fluids*, 46(3):371.
- [55] Han, J. and Tryggvason, G. (1999). Secondary breakup of axisymmetric liquid drops. i. acceleration by a constant body force. *Physics of Fluids*, 11(12):3650–3667.
- [56] Harlow, F. H. and Welch, J. E. (1965). Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *The physics of fluids*, 8(12):2182–2189.
- [57] Heywood, J. (1988). *Internal Combustion Engine Fundamentals*. Springer.
- [58] Hiroyasu, H., Arai, M., and Tabata, M. (1989). *Empirical equations for the sauter mean diameter of a diesel spray*. Society of Automotive Engineers.
- [59] Hirsch, C. (2007). *Numerical computation of internal and external flows: The fundamentals of computational fluid dynamics*. Butterworth-Heinemann.
- [60] Hirt, C. W. and Nichols, B. D. (1981). Volume of fluid (vof) method for the dynamics of free boundaries. *Journal of computational physics*, 39(1):201–225.

- [61] Hoyas, S., Gil, A., Margot, X., Khuong-Anh, D., and Ravet, F. (2013). Evaluation of the eulerian–lagrangian spray atomization (elsa) model in spray simulations: 2d cases. *Mathematical and Computer Modelling*, 57(7):1686–1693.
- [62] Hoyas Calvo, S. et al. (2012). *The Eulerian-Lagrangian Spray Atomization (EL-SA) Model of the Jet Atomization in CFD Simulations: Evaluation and Validation*. PhD thesis.
- [63] Hoyt, J. and Taylor, J. (1977). Turbulence structure in a water jet discharging in air. *The Physics of Fluids*, 20(10):S253–S257.
- [64] Hubbard, G., Denny, V., and Mills, A. (1975). Droplet evaporation: effects of transients and variable properties. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 18(9):1003–1008.
- [65] Huh, K. (1991). A phenomenological model of diesel spray atomization. In *Proc. of The International Conf. on Multiphase Flows' 91-Tsukuba*.
- [66] Huh, K. Y., Lee, E., and Koo, J. (1998). Diesel spray atomization model considering nozzle exit turbulence conditions. *Atomization and Sprays*, 8(4).
- [67] Ishii, M. (1975). Thermo-fluid dynamic theory of two-phase flow. *NASA STI/Recon Technical Report A*, 75:29657.
- [68] Issa, R. (1985). Solution of the implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, 62:40–65.
- [69] Issa, R. I. (1986). Solution of implicitly discretized fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, 62:40–65.
- [70] Jain, M., Prakash, R. S., Tomar, G., and Ravikrishna, R. (2015). Secondary breakup of a drop at moderate weber numbers. *Proc. R. Soc. A*, 471(2177):20140930.
- [71] Jain, S. S., Tyagi, N., Prakash, R. S., Ravikrishna, R., and Tomar, G. (2018). Secondary breakup of drops at moderate weber numbers: Effect of density ratio and reynolds number. *arXiv preprint arXiv:1803.02989*.
- [72] Jarrahbashi, D. and Sirignano, W. (2014). Vorticity dynamics for transient high-pressure liquid injection. *Physics of Fluids*, 26(10):73.
- [73] Jarrahbashi, D., Sirignano, W., Popov, P., and Hussain, F. (2016). Early spray development at high gas density: hole, ligament and bridge formations. *Journal of Fluid Mechanics*, 792:186–231.
- [74] Jasak, H. (1996). *Error analysis and estimation for the Finite Volume Method with applications to fluid flows*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine.
- [75] Jasak, H. (2006). Numerical solution algorithms for compressible flows. *Lecture Notes Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture, University of Zagreb, Croatia, Academic Year, 2007*.
- [76] JO, H. (1959). Turbulence. an introduction to its mechanism and theory.

- [77] Kaario, O., Larmi, M., and Tanner, F. (2002). Non-evaporating liquid spray simulations with the ETAB and WAVE droplet breakup models. *Zaragoza*, 9(11).
- [78] Kékesi, T., Amberg, G., and Wittberg, L. P. (2014). Drop deformation and breakup. *International Journal of Multiphase Flow*, 66:1–10.
- [79] Klein, M., Sadiki, A., and Janicka, J. (2003). A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of computational Physics*, 186(2):652–665.
- [80] Kofman, E. (2015). Modelado y simulación de sistemas dinámicos: Métodos, algoritmos y herramientas.
- [81] Kolmogorov, A. N. (1962). A refinement of previous hypotheses concerning the local structure of turbulence in a viscous incompressible fluid at high reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 13(1):82–85.
- [82] Lafaurie, B., Nardone, C., Scardovelli, R., Zaleski, S., and Zanetti, G. (1994). Modelling merging and fragmentation in multiphase flows with surfer. *Journal of Computational Physics*, 113(1):134–147.
- [83] Laplace, P.-S. and Celeste, M. (1805). Vol. 4. *Courier, Paris*.
- [84] Le Chenadec, V. and Pitsch, H. (2013). A conservative framework for primary atomization computation and application to the study of nozzle and density ratio effects. *Atomization and Sprays*, 23(12).
- [85] Lebas, R., Menard, T., Beau, P.-A., Berlemont, A., and Demoulin, F.-X. (2009). Numerical simulation of primary break-up and atomization: Dns and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3):247–260.
- [86] Lee, C. S., Kim, H. J., and Park, S. W. (2004). Atomization characteristics and prediction accuracies of hybrid break-up models for a gasoline direct injection spray. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, 218(9):1041–1053.
- [87] Lefebvre, A. H. and McDonell, V. G. (2017). *Atomization and sprays*. CRC press.
- [88] Leonard, B. P. (1979). A stable and accurate convective modelling procedure based on quadratic upstream interpolation. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 19(1):59–98.
- [89] Li, Z.-H., He, B.-Q., and Zhao, H. (2014). Application of a hybrid breakup model for the spray simulation of a multi-hole injector used for a DISI gasoline engine. *Applied Thermal Engineering*, 65(1):282–292.
- [90] Liang, C. (2016). Computational methods for the investigation of liquid drop phenomena in external gas flows. *MTU*.
- [91] Lilly, D. K. (1992). A proposed modification of the germano subgrid-scale closure method. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 4(3):633–635.

- [92] Ling, Y., Fuster, D., Tryggvason, G., and Zaleski, S. (2018). A two-phase mixing layer between parallel gas and liquid streams: multiphase turbulence statistics and influence of interfacial instability. *arXiv preprint arXiv:1808.01996*.
- [93] Ling, Y., Fuster, D., Zaleski, S., and Tryggvason, G. (2017a). Spray formation in a quasiplanar gas-liquid mixing layer at moderate density ratios: a numerical closeup. *Physical Review Fluids*, 2(1):014005.
- [94] Ling, Y., Legros, G., Popinet, S., and Zaleski, S. (2017b). Direct numerical simulation of an atomizing biodiesel jet: Impact of fuel properties on atomization characteristics. In *Ilass Europe. 28th european conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, pages 370–377. Editorial Universitat Politècnica de València.
- [95] Ling, Y., Zaleski, S., and Scardovelli, R. (2015). Multiscale simulation of atomization with small droplets represented by a lagrangian point-particle model. *International Journal of Multiphase Flow*, 76:122–143.
- [96] Liu, X.-D., Osher, S., and Chan, T. (1994). Weighted essentially non-oscillatory schemes. *Journal of computational physics*, 115(1):200–212.
- [97] Löhner, R. (2008). *Applied computational fluid dynamics techniques: an introduction based on finite element methods*. John Wiley & Sons.
- [98] Lucchini, T., D’Errico, G., Ettorre, D., Brusiani, F., Bianchi, G. M., Montanaro, A., and Allocca, L. (2010). Experimental and numerical investigation of high-pressure diesel sprays with multiple injections at engine conditions. Technical report, SAE Technical Paper.
- [99] Malikopoulos, A. A. (2014). Supervisory power management control algorithms for hybrid electric vehicles: A survey. *IEEE Transactions on intelligent transportation systems*, 15(5):1869–1885.
- [100] Maric, T., Marschall, H., and Bothe, D. (2013). vofoam-a geometrical volume of fluid algorithm on arbitrary unstructured meshes with local dynamic adaptive mesh refinement using openfoam. *arXiv preprint arXiv:1305.3417*.
- [101] Marmottant, P. and Villermaux, E. (2004). On spray formation. *Journal of fluid mechanics*, 498:73–111.
- [102] Marquez Damian, S. (2013). *An extended mixture model for the simultaneous treatment of short and long scale interfaces*. PhD thesis, Universidad Nacional del Litoral.
- [103] Matas, J.-P., Marty, S., and Cartellier, A. (2011). Experimental and analytical study of the shear instability of a gas-liquid mixing layer. *Physics of fluids*, 23(9):094112.
- [104] Maurya, R. K., Maurya, R. K., and Luby (2018). *Characteristics and Control of Low Temperature Combustion Engines*. Springer.
- [105] Ménard, T., Tanguy, S., and Berlemont, A. (2007). Coupling level set/vof/ghost fluid methods: Validation and application to 3d simulation of the primary break-up of a liquid jet. *International Journal of Multiphase Flow*, 33(5):510–524.

- [106] Miller, T. F. (1996). Fourier analysis of the SIMPLE algorithm formulated on a collocated grid. *Numerical Heat Transfer*, 30(1):45–66.
- [107] Mitkin, V. and Theofanous, T. (2017). The physics of aerobreakup. iv. strain-thickening liquids. *Physics of Fluids*, 29(12):122101.
- [108] Moukalled, F., Mangani, L., and Darwish, M. (2016). *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics*. Springer.
- [109] Nicholls, J. and Ranger, A. (1969). Aerodynamic shattering of liquid drops. *Aiaa Journal*, 7(2):285–290.
- [110] Noh, W. F. and Woodward, P. (1976). Slic (simple line interface calculation). In *Proceedings of the Fifth International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics June 28–July 2, 1976 Twente University, Enschede*, pages 330–340. Springer.
- [111] Ohnesorge, W. V. (1936). Die bildung von tropfen an düsen und die auflösung flüssiger strahlen. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 16(6):355–358.
- [112] OpenFOAM(R) (2015). The Open Source CFD Toolbox. www.openfoam.com.
- [113] O’Rourke, P. J. and Amsden, A. A. (1987). The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup. Technical report, SAE Technical Paper.
- [114] Outlook, A. E. (2016). Us energy information administration: Washington. DC, USA.
- [115] Owkes, M. and Desjardins, O. (2014). A computational framework for conservative, three-dimensional, unsplit, geometric transport with application to the volume-of-fluid (vof) method. *Journal of Computational Physics*, 270:587–612.
- [116] Ozhan, C., Fuster, D., and Da Costa, P. (2013). Efficient error estimation criteria to capture vortical structures in octree meshes. In *APS Meeting Abstracts*.
- [117] Pairetti, C., Damián, S. M., and Nigro, N. (2017a). On the error analysis for geometrical volume of fluid methods. In MECOM, editor, *Mecánica Computacional*. AMCA.
- [118] Pairetti, C., Márquez Damián, S., and Nigro, N. (2016). Applying the volume of fluid technique on atomization simulations. In MECOM, editor, *Mecánica Computacional*. AMCA.
- [119] Pairetti, C., Popinet, S., Márquez Damián, S., Nigro, N., and Zaleski, S. (2017b). Direct numerical simulations of a single drop in bag mode break-up. In MECOM, editor, *MECOM 2017*. AMCA.
- [120] Pairetti, C., Popinet, S., Márquez Damián, S., Nigro, N., and Zaleski, S. (2018a). Bag mode breakup simulations of a single liquid droplet. In ECCOMAS, editor, *ECCM-ECFD 2018*. University of Glasgow, University of Edinburg.
- [121] Pairetti, C., Popinet, S., Márquez Damián, S., Nigro, N., and Zaleski, S. (2018b). Simulación de atomización mediante VOF con AMR. In MECOM, editor, *MECOM 2018*. AMCA.

- [122] Pairetti, C., Popinet, S., Márquez Damián, S., Nigro, N., and Zaleski, S. (2018c). Simulación vof-amr de atomización de combustible. In MTL, editor, *MTL 2018*. CONICET-UTN.
- [123] Passalacqua, A. and Fox, R. O. (2011). Implementation of an iterative solution procedure for multi-fluid gas-particle flow models on unstructured grids. *Powder Technology*, 213(1):174–187.
- [124] Patankar, S. (1980). *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Company.
- [125] Patankar, S. V. (1981). A calculation procedure for two-dimensional elliptic situations. *Numerical Heat Transfer*, 4(4):409–425.
- [126] Patankar, S. V. and Spalding, D. B. (1972). A calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(10):1787–1806.
- [127] Pekker, L. (2017). Plateau-rayleigh instability of a cylinder of viscous liquid (rayleigh vs. chandrasekhar). *arXiv preprint arXiv:1712.07069*.
- [128] Pilch, M. and Erdman, C. (1987). Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International journal of multiphase flow*, 13(6):741–757.
- [129] Pilliod, J. E. and Puckett, E. G. (2004). Second-order accurate volume-of-fluid algorithms for tracking material interfaces. *Journal of Computational Physics*, 199(2):465–502.
- [130] Plateau, J. (1873). Statique expérimentale et theorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires. *Paris: Gauthier Villars*, 2(-):-.
- [131] Pope, S. B. (2001). *Turbulent flows*.
- [132] Popinet, S. (2003). Gerris: a tree-based adaptive solver for the incompressible euler equations in complex geometries. *Journal of Computational Physics*, 190(2):572–600.
- [133] Popinet, S. (2009). An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. *Journal of Computational Physics*, 228:5838–5866.
- [134] Popinet, S. (2014). The basilisk code: <http://basilisk.fr/>.
- [135] Popinet, S. (2018). Numerical models of surface tension. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 50:49–75.
- [136] Pringuey, T. R. C. M. (2012). *Large eddy simulation of primary liquid-sheet breakup*. PhD thesis, University of Cambridge.
- [137] Puckett, E. G., Almgren, A. S., Bell, J. B., Marcus, D. L., and Rider, W. J. (1997). A high-order projection method for tracking fluid interfaces in variable density incompressible flows. *Journal of computational physics*, 130(2):269–282.

- [138] Qu, Z., Tao, W., and He, Y. (2004). Implementation of CLEAR algorithm on collocated grid system and application examples. *Numerical Heat Transfer*, 47(1):65–96.
- [139] Rangel, R. and Sirignano, W. (1991). The linear and nonlinear shear instability of a fluid sheet. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics*, 3(10):2392–2400.
- [140] Rayleigh, L. (1878). On the instability of jets. *Proceedings of the London mathematical society*, 1(1):4–13.
- [141] Rayleigh, L. (1879). On the capillary phenomena of jets. *Proc. R. Soc. London*, 29(196-199):71–97.
- [142] REITZ, R. et al. (1987). Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomisation and Spray Technology*, 3(4):309–337.
- [143] Reitz, R. D. (1978). Atomization and other breakup regimes of a liquid jet.
- [144] Reitz, R. D. (2013). Directions in internal combustion engine research. *Combustion and Flame*, 1(160):1–8.
- [145] Reitz, R. D. and Diwakar, R. (1987). Structure of high-pressure fuel sprays. Technical report, SAE Technical Paper.
- [146] Renardy, Y. and Renardy, M. (2002). Prost: a parabolic reconstruction of surface tension for the volume-of-fluid method. *Journal of computational physics*, 183(2):400–421.
- [147] Roenby, J., Bredmose, H., and Jasak, H. (2016). A computational method for sharp interface advection. *arXiv preprint arXiv:1601.05392*.
- [148] Rudman, M. (1998). A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations. *International Journal for numerical methods in fluids*, 28(2):357–378.
- [149] Rusche, H. (2003). *Computational fluid dynamics of dispersed two-phase flows at high phase fractions*. PhD thesis, Imperial College London (University of London).
- [150] Sagaut, P. (2013). *Multiscale and multiresolution approaches in turbulence: LES, DES and hybrid RANS/LES methods: applications and guidelines*. World Scientific.
- [151] Salvador, F. J., Carreres, M., Cialesi-Esposito, M., and Plazas, A. H. (2017). Determination of critical operating and geometrical parameters in diesel injectors through one dimensional modelling, design of experiments and an analysis of variance. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, page 0954407017735262.
- [152] Santiago, M. D., César, P., and Norberto, N. (2017). Implementation of a geometrical reconstruction interphase algorithm over openfoam(r). In MECOM, editor, *Mecánica Computacional*. AMCA.
- [153] Savart, F. (1833). Mémoire sur le choc d’une veine liquide lancée contre un plan circulaire. *Ann. chim*, 54(56):1833.

- [154] Scardovelli, R. and Zaleski, S. (1999). Direct numerical simulation of free-surface and interfacial flow. *Annual review of fluid mechanics*, 31(1):567–603.
- [155] Scardovelli, R. and Zaleski, S. (2000). Analytical relations connecting linear interfaces and volume fractions in rectangular grids. *Journal of Computational Physics*, 164(1):228–237.
- [156] Schneider, K. and Vasilyev, O. V. (2010). Wavelet methods in computational fluid dynamics. *Annual review of fluid mechanics*, 42.
- [157] Senecal, P., Schmidt, D. P., Nouar, I., Rutland, C. J., Reitz, R. D., and Corradini, M. (1999). Modeling high-speed viscous liquid sheet atomization. *International Journal of Multiphase Flow*, 25(6-7):1073–1097.
- [158] Sharp, D. H. (1983). Overview of rayleigh-taylor instability. Technical report, Los Alamos National Lab., NM (USA).
- [159] Shinjo, J. and Umemura, A. (2010). Simulation of liquid jet primary breakup: Dynamics of ligament and droplet formation. *International Journal of Multiphase Flow*, 36(7):513–532.
- [160] Spalding, D. B. (1953). The combustion of liquid fuels. In *Symposium (international) on combustion*, volume 4, pages 847–864. Elsevier.
- [161] Squire, H. (1953). Investigation of the instability of a moving liquid film. *British Journal of Applied Physics*, 4(6):167.
- [162] Subramanian, K. and Babu, M. G. (2013). *Alternative transportation fuels: utilisation in combustion engines*. CRC Press.
- [163] Sun, D., Qu, Z., He, Y., and Tao, W. (2008). An efficient segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems—ideal (inner doubly iterative efficient algorithm for linked equations) part i: Mathematical formulation and solution procedure. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 53(1):1–17.
- [164] Sun, G. and Domaradzki, J. A. (2018). Implicit les using adaptive filtering. *Journal of Computational Physics*.
- [165] Sussman, M. and Puckett, E. G. (2000). A coupled level set and volume-of-fluid method for computing 3d and axisymmetric incompressible two-phase flows. *Journal of Computational Physics*, 162(2):301–337.
- [166] Takewaki, H., Nishiguchi, A., and Yabe, T. (1985). Cubic interpolated pseudo-particle method (cip) for solving hyperbolic-type equations. *Journal of computational physics*, 61(2):261–268.
- [167] Tao, W. Q., Qu, Z. G., and He, Y. L. (2004). A novel segregated algorithm for incompressible fluid flow and heat transfer problems - CLEAR (coupled and linked equations algorithm revised) part I: Mathematical formulation and solution procedure. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 45(1):1–17.
- [168] Tao, Hiroyuki Ozoe, W.-Q. (2001). A modified pressure-correction scheme for the SIMPLER method, MSIMPLER. *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, 39(5):435–449.

- [169] Taylor, G. (1950). The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. I. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 201, pages 192–196. The Royal Society.
- [170] Tennekes, H., Lumley, J. L., Lumley, J., et al. (1972). *A first course in turbulence*. MIT press.
- [171] Theofanous, T. (2011). Aerobreakup of newtonian and viscoelastic liquids. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 43:661–690.
- [172] Tomar, G., Fuster, D., Zaleski, S., and Popinet, S. (2010). Multiscale simulations of primary atomization. *Computers & Fluids*, 39(10):1864–1874.
- [173] Trask, N. A. (2010). Implementation of an eulerian atomization model to characterize primary spray formation. *Masters Theses*, page 434.
- [174] Tryggvason, G., Scardovelli, R., and Zaleski, S. (2011). *Direct numerical simulations of gas-liquid multiphase flows*. Cambridge University Press.
- [175] Turner, M., Sazhin, S., Healey, J., Crua, C., and Martynov, S. (2012). A breakup model for transient Diesel fuel sprays. *Fuel*, 97:288–305.
- [176] US, D. (2011). A workshop to identify research needs and impacts in predictive simulation for internal combustion engines (presice). In *Workshop, US Department of Energy*.
- [177] Vallet, A. and Borghi, R. (1999). Modélisation eulerienne de l’atomisation d’un jet liquide. *Comptes Rendus de l’Académie des Sciences-Series IIB-Mechanics-Physics-Astronomy*, 327(10):1015–1020.
- [178] Van Doormaal, J. and Raithby, G. (1984). Enhancements of the SIMPLE method for predicting incompressible fluid flows. *Numerical Heat Transfer*, 7(2):147–163.
- [179] van Hooft, J. A., Popinet, S., van Heerwaarden, C. C., van der Linden, S. J., de Roode, S. R., and van de Wiel, B. J. (2018). Towards adaptive grids for atmospheric boundary-layer simulations. *Boundary-Layer Meteorology*, pages 1–23.
- [180] Venier, C. M. (2018). *Resolución Computacional de Flujos Multifásicos Granulares por Métodos Eulerianos*. PhD thesis, Universidad Nacional del Litoral, Argentina.
- [181] Venier, C. M., Pairetti, C. I., Damian, S. M., and Nigro, N. M. (2017a). Fourier stability analysis applied to navier-stokes segregated algorithms. *Computers & Fluids*, 147:25–40.
- [182] Venier, C. M., Pairetti, C. I., Damian, S. M., and Nigro, N. M. (2017b). On the stability analysis of the piso algorithm on collocated grids. *Computers & Fluids*, 147:25–40.
- [183] Versteeg (2002). *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer.
- [184] Vreman, A. (2004). An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow: Algebraic theory and applications. *Physics of fluids*, 16(10):3670–3681.

- [185] Vujanović, M., Petranović, Z., Edelbauer, W., and Duić, N. (2016). Modelling spray and combustion processes in diesel engine by using the coupled eulerian–eulerian and eulerian–lagrangian method. *Energy Conversion and Management*.
- [186] Wavelet Algorithm (2018). The adaptive wavelet algorithm. http://basilisk.fr/sandbox/Antoonvh/The_adaptive_wavelet_algorithm.
- [187] Weber, C. (1931). Zum zerfall eines flüssigkeitsstrahles. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 11(2):136–154.
- [188] Weller, H. G. (2008). A new approach to vof-based interface capturing methods for incompressible and compressible flow. *OpenCFD Ltd., Report TR/HGW*, 4.
- [189] Weller, H. G., Tabor, G., Jasak, H., and Fureby, C. (1998). A tensorial approach to computational continuum mechanics using object-oriented techniques. *Computers in Physics*, 12(6):620–631.
- [190] Weymouth, G. D. and Yue, D. K.-P. (2010). Conservative volume-of-fluid method for free-surface simulations on cartesian-grids. *Journal of Computational Physics*, 229(8):2853–2865.
- [191] Wu, K.-J., Reitz, R., and Bracco, F. (1986). Measurements of drop size at the spray edge near the nozzle in atomizing liquid jets. *The Physics of fluids*, 29(4):941–951.
- [192] Xiao, F., Li, S., and Chen, C. (2011). Revisit to the thinc scheme: a simple algebraic vof algorithm. *Journal of Computational Physics*, 230(19):7086–7092.
- [193] Xin, J., Ricart, L., and Reitz, R. (1998). Computer modeling of diesel spray atomization and combustion. *Combustion science and technology*, 137(1-6):171–194.
- [194] Yeom, J.-K., Lee, M.-J., Chung, S.-S., Ha, J.-Y., Senda, J., and Fujimoto, H. (2002). A proposal for diesel spray model using a TAB breakup model and discrete vortex method. *KSME international journal*, 16(4):532–548.
- [195] Young, T. et al. (1805). Iii. an essay on the cohesion of fluids. *Philosophical transactions of the royal society of London*, 95:65–87.
- [196] Youngs, D. L. (1982). Time-dependent multi-material flow with large fluid distortion. *Numerical methods for fluid dynamics*.
- [197] Yu, Y., Li, G., Wang, Y., and Ding, J. (2016). Modeling the atomization of high-pressure fuel spray by using a new breakup model. *Applied Mathematical Modelling*, 40(1):268–283.
- [198] Zandian, A., Sirignano, W., and Hussain, F. (2017). Planar liquid jet: Early deformation and atomization cascades. *Physics of Fluids*, 29(6):062109.
- [199] Zanotti, A. L. (2007). *Modelado del flujo multifase en la producción de acero por colada continua*. PhD thesis, Universidad Nacional del Litoral.

- [200] Zhang, B., Legros, G., Popinet, S., Zaleski, S., and Ling, Y. (2018). Effect of fuel viscosity on the atomization of diesel and biodiesel jets. In *ICLASS Europe. 14th triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, pages 370–377. University of Illinois.